

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

ISRAEL BAHIA COSTA

**AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DO MODELO DE TURBULÊNCIA k-
 ω SST PARA DISPERSÃO DE POLUENTES AO REDOR DE
OBSTÁCULO CÚBICO EM DIFERENTES CONDIÇÕES DE
ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA**

VITÓRIA

2016

ISRAEL BAHIA COSTA

**AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DO MODELO DE TURBULÊNCIA
k- ω SST PARA DISPERSÃO DE POLUENTES AO REDOR DE
OBSTÁCULOS EM DIFERENTES CONDIÇÕES DE ESTABILIDADE
ATMOSFÉRICA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Espírito Santo como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Ambiental.

Orientadora: Prof. Jane Meri Santos

Coorientador: Prof. Bruno Furieri

Prof. Harerton Oliveira Dourado

VITÓRIA

2016

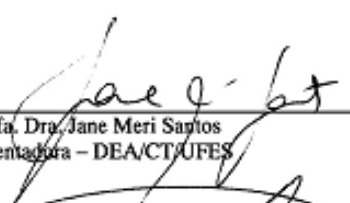


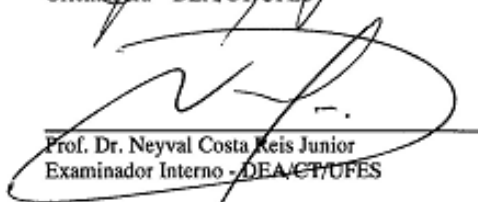
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL


**“AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DO MODELO DE TURBULÊNCIA k-
ÔMEGA SST PARA DISPERSÃO DE POLUENTES AO REDOR DE
OBSTÁCULO CÚBICO EM DIFERENTES CONDIÇÕES DE
ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA”.**

ISRAEL BAHIA COSTA

Banca Examinadora:


Prof. Dra. Jane Meri Santos
Orientadora – DEA/CT/UFES


Prof. Dr. Neyval Costa Reis Junior
Examinador Interno – DEA/CT/UFES


Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França
Examinador Externo – UFRGS

O julgamento desta dissertação foi realizado com a participação por meio de videoconferência do **membro externo** o Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França seguindo as normas prescritas na portaria normativa nº. 2/2016. Desse modo, a assinatura do membro externo é representada neste documento pela respectiva assinatura do presidente da comissão julgadora, a Profa. Dra. Jane Méri Santos.

Coordenador do PPGEA: Prof. Dr. Edmilson Costa Teixeira
UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
Vitória, ES, 15 de Julho de 2016.

Av. Fernando Ferrari, 514 Campus Universitário, Golabelras - Vitória - ES - CEP 29075-910 - Tel. (27) 3335 2324 - Ramal *5110.

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Setorial Tecnológica,
Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

C837a Costa, Israel Bahia, 1984-
Avaliação de desempenho do modelo de turbulência $k-\omega$ SST
para dispersão de poluentes ao redor de obstáculo cúbico em
diferentes condições de estabilidade atmosférica / Israel Bahia
Costa. – 2016.
96 f. : il.

Orientador: Jane Meri Santos.
Coorientador: Bruno Furieri.
Coorientador: Harerton Oliveira Dourado.
Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) –
Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Ar – Poluição. 2. Dispersão. 3. Atmosfera – Estabilidade.
4. Turbulência atmosférica. 5. Obstáculo cúbico. I. Santos, Jane
Meri. II. Furieri, Bruno. III. Dourado, Harerton Oliveira. IV.
Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. V.
Título.

CDU: 628

AGRADECIMENTOS

A Deus, por tudo o que fez e está fazendo na minha vida. Obrigado, Deus, por me incluir nos seus planos, crescer contigo e o impossível conquistar.

Aos meus pais, Bena e Jura, por me ensinarem que educação é um valor.

Aos meus irmãos Janglely, Sara e Priscila, pela amizade de sempre. Aos meus queridos sobrinhos Miguel e Davi por me surpreenderem com boas risadas.

À minha querida Betânia pelo incentivo, carinho e por juntos acreditarmos que vale a pena sonhar, porque o que se sonha junto é realidade.

Aos grandes amigos do NQualiar: Enilene, Maria Clara, Edilson e Israel Pestana pessoas que tornaram a minha estada aqui muito mais leve e agradável.

Ao professor Bruno Furieri, pelo grande apoio e, em especial, pela amizade ao longo desta jornada. Obrigado pelos ensinamentos que vão além dos registros aqui apresentados neste trabalho e que certamente levarei para a minha vida.

Ao professor Harerton Oliveira Dourado, por estar sempre disponível e pela presteza em responder as dúvidas que tive ao longo da pesquisa.

À professora Jane Meri Santos, por guiar meu trabalho com excepcional competência e inteligência.

Ao professor Neyval Costa Reis Junior, pelas dicas para os ajustes do modelo de turbulência.

Ao professor Francis H. R. França, pelas relevantes contribuições para aprimoramento da dissertação.

Ao amigo Marcelo Azeredo por auxiliar na compreensão do *software*.

À secretária do PPGEA Rose Leão por atuar como facilitadora.

A PETROBRAS, por me oferecer enquanto empregado, a possibilidade de dedicar parte do meu tempo aos estudos.

Ao CNPQ, à CAPES e à FAPES, pelo apoio financeiro ao programa de pós-graduação em Engenharia Ambiental da UFES.

“Valeu a pena? Tudo vale a pena
Se a alma não é pequena.
Quem quer passar além do Bojador
Tem que passar além da dor.
Deus ao mar o perigo e o abismo deu,
Mas nele é que espelhou o céu”.

Fernando Pessoa

RESUMO

O principal objetivo do presente estudo consiste em avaliar o desempenho do modelo de turbulência $k-\omega$ SST (*Shear Stress Transport*) em simular o escoamento e a dispersão de compostos gasosos ao redor de obstáculo cúbico isolado, sob condições de estabilidade atmosférica neutra, estável e instável. O método dos volumes finitos com malha não estruturada formada por elementos de volume tetraédricos e prismáticos é utilizado para a solução numérica das equações de conservação, através da utilização do *software* comercial *Ansys Fluent*. Foram simuladas duas configurações experimentais publicadas na literatura científica: (i) experimento em túnel de vento (MURAKAMI et al., 1990) com $Re \approx 60000$, a fim de avaliar a sensibilidade das constantes empíricas do modelo de turbulência – a_1 (influência na viscosidade turbulenta) e C_{lim} (influência na limitação da produção de energia cinética turbulenta nas zonas de estagnação) e comparar com outros modelos de turbulência; (ii) experimento em campo (MAVROIDIS et al., 1999) com $Re \approx 70000$, com a finalidade de avaliar a influência das condições de estabilidade atmosférica na pluma de contaminantes e no decaimento temporal da concentração após a interrupção da emissão. Nesse caso, foram utilizadas as constantes empíricas que melhor reproduziram o experimento de Murakami et al. (1990). Observou-se a influência das constantes empíricas na predição do comprimento da zona de recirculação atrás do prédio e da energia cinética turbulenta. Foram encontrados valores dessas constantes que forneceram melhores resultados quando comparados aos encontrados na literatura com outros modelos de turbulência. Os campos de concentração apresentaram boa concordância aos dados experimentais de Mavroidis et al. (1999). O modelo de turbulência $k-\omega$ SST superestimou o tempo de residência do composto na esteira turbulenta, quando comparado com os resultados experimentais em campo, embora tenha obtido erros percentuais ligeiramente menores que outro modelo de turbulência ($k-l$), previamente simulado por Mavroidis et al. (2012). A estabilidade atmosférica não apresentou influência significativa na pluma de contaminantes para os cenários avaliados, a influência significativa foi relacionada à intensidade da velocidade do vento. Desse modo, a presença do obstáculo parece influenciar mais significativamente a intensidade de turbulência por meio das tensões cisalhantes que as condições de estabilidade atmosférica por meio do empuxo térmico.

Palavras-chave: Estabilidade atmosférica. Obstáculo cúbico. Turbulência. Simulação numérica.

ABSTRACT

The main objective of this study is to evaluate the performance of the turbulence model $k-\omega$ SST (Shear Stress Transport), by means of numerical simulations based on the solution of the conservation equations (mass, momentum, energy and chemical species). We investigated the flow and dispersion of gaseous isolated compounds around the cubic obstacle, under neutral atmospheric stability conditions, both stable and unstable. The finite volume method with unstructured mesh formed by tetrahedral and prismatic volume elements is used for the numerical solution of the conservation equations through the use of the commercial software for computational fluid dynamics, Ansys Fluent. Two experimental configurations published in the scientific literature were simulated: (i) wind tunnel (MURAKAMI et al, 1990) with Reynolds number (Re) based on the height of the obstacle (H) and speed H approximately equal to 60000 used to test the sensitivity of the empirical constants of the turbulence model (influence in the turbulent viscosity) and (influence on the limitation of the production of the turbulent kinetic energy production in stagnant zones) and to compare with other turbulent models (ii) field experiment (MAVROIDIS et al., 1999) with $Re \approx 70000$, in order to evaluate the influence of the atmospheric stability conditions of the plume contaminants and the concentration of decay after the interruption of the emission. In this case, the empirical constants that produced the best experiment Murakami et al. (1990) were used. It was observed the influence of empirical constants for the prediction of recirculation zone length behind the building and a prediction of turbulent kinetic energy when compared with other turbulence models. The concentration fields had good agreement with the experimental data Mavroidis et al. (1999). The turbulence model $k-\omega$ SST overestimated the compound residence time in the turbulent wake when compared with the experimental results in the field, although it had slightly smaller percentage errors than other turbulence model ($k-l$) that were previously simulated Mavroidis et al. (2012). The atmospheric stability not significantly influence the plume of contaminants to the scenarios evaluated. The most significant impact was related to the intensity of the wind velocity. Thus, the presence of the obstacle seems to influence more significantly the turbulence intensity due to shear stresses than atmospheric stability by means of thermal buoyancy.

Keywords: Atmospheric stability. Cubic obstacle. Turbulence. Numerical simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1– Representação esquemática do escoamento ao redor de um prédio cúbico – vista do plano central.	21
Figura 2– Estruturas típicas do escoamento ao redor de um obstáculo cúbico – perspectiva tridimensional.	22
Figura 3 – Espectro Energia Cinética Turbulenta em função do número de onda.	27
Figura 4 –Perfis de temperatura e condições de estabilidade atmosférica.	39
Figura 5 – Representação da discretização do domínio computacional através da técnica dos volumes finitos	41
Figura 6 – Representação da discretização do domínio computacional através da técnica dos volumes finitos.	42
Figura 7 – Representação esquemática do domínio computacional e condições de contorno.	53
Figura 8 – Perfil vertical de velocidade média, ECT e taxa de dissipação específica na entrada do domínio.	55
Figura 9 –Visualização da malha construída para este estudo: (a) vista geral, (b) vista ampliada do plano central e prédio, (c) vista ampliada no plano central do prédio e (d) representação do detalhe A.	56
Figura 10 – Vista superior da disposição do cubo em relação à fonte e posição dos detectores. Fonte: Mavroidis et al. (1999).	57
Figura 11 – Vista do plano xz (em $y=0,0$), localização do cubo em relação à fonte e posição dos detectores. Fonte: Mavroidis et al. (1999).	58
Figura 12 – Perfil vertical da velocidade média, ECT e temperatura na entrada do domínio para os casos testes.	59
Figura 13 – Representação esquemática do domínio computacional e condições de contorno.	60
Figura 14 – Representação das malhas computacionais testadas.	63
Figura 15 – Perfil vertical de ECT, U e K em diferentes perfis na esteira turbulenta.	63

Figura 16 – Contorno de velocidade na direção longitudinal. Vista do plano central do prédio para as seguintes constantes empíricas: (a) TS-1, (b) TS-2, (c) TS-3, (d) TS-4, (e) TS-5, (f) TS-6, (g) TS-7 e (h) TS-8, com uso do modelo k- ω SST.	68
Figura 17 – Contorno de Energia cinética turbulenta. Vista do plano central do prédio para as seguintes constantes empíricas: (a) TS-1, (b) TS-2, (c) TS-3, (d) TS-4, (e) TS-5, (f) TS-6, (g) TS-7 e (h) TS-8, com uso do modelo k- ω SST.	69
Figura 18 – Campo de Velocidade no plano central do prédio para os diferentes modelos de turbulência.	73
Figura 19 – Distribuição de Energia cinética turbulenta normalizado por U_H^2	73
Figura 20 – Distribuição de $\overline{u_1' u_1'}$ normalizado por U_H^2	75
Figura 21 – Distribuição de $\overline{u_2' u_2'}$ normalizado por U_H^2	76
Figura 22 – Distribuição de $\overline{u_3' u_3'}$ normalizado por U_H^2	77
Figura 23 – Distribuição de velocidade longitudinal em plano vertical (xz) em y/H=0,0.....	78
Figura 24 – Distribuição de velocidade longitudinal em vista superior no plano horizontal (xy) localizado em z/H=0,5H.	79
Figura 25 – Campo de vetores de velocidade no plano central do prédio, modelo k- ω SST... ..	80
Figura 26 – Distribuição de ECT adimensionalizado por U_H^2	81
Figura 27 – Comparação dos perfis verticais de concentração localizado à jusante do prédio em 0,75H: atmosfera instável e estável.	83
Figura 28 – Contorno de concentração adimensional, K, vista do plano central do prédio (a) ID 4-2 (estável / baixa velocidade do vento); (b) ID 5-5 (instável).	854
Figura 29 – Localização dos detectores, plano xy em z/H=0,5.	845
Figura 30 – Comparação do decaimento temporal nos detectores para diferentes condições de estabilidade atmosférica: (a) ID 5-5, instável, (b) ID 6-4, estável e (c) ID 4-2, estável e ventos fracos.	86

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Comprimento de Monin-Obukhov em relação às classes de estabilidade atmosférica.	41
Tabela 2 – Condições de contorno na entrada do domínio utilizada para representar o experimento realizado por Murakami et al. (1990)	53
Tabela 3 – Detalhes da simulação numérica para os casos testes. Vazão da fonte, velocidade de escoamento na altura do prédio e parâmetros de estabilidade atmosférica.	59
Tabela 4 – Condições de contorno na entrada do domínio utilizada para representar o experimento realizado por Mavroidis et al. (1999)	60
Tabela 5 – Parâmetros alterados nos testes de sensibilidade do modelo k- ω SST.....	66
Tabela 6 – Comprimento da zona de recirculação atrás do prédio para cada teste de sensibilidade realizado.....	67
Tabela 7 – Comprimento da região de recirculação atrás do prédio (normalizado por H)	70
Tabela 8 – Comparação do tempo de residência (T_d) e tempo de residência adimensional (τ) do decaimento da concentração do composto gasoso	87

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

		Unidade (SI)
a_1	Constante empírica do modelo $k-\omega$ SST	[]
c	Concentração do contaminante	[kg m ⁻³]
c_p	Calor específico à pressão constante	[J kg ⁻¹ s ⁻¹]
C_μ, C_1, C_2, C_3	Constantes empíricas do modelo $k - \epsilon$	[kg m ⁻³]
D_m	Difusividade molecular do contaminante no ar	[m ² s ⁻¹]
ECT	Energia cinética turbulenta	[m ² s ⁻²]
g	Aceleração da gravidade	[m s ⁻²]
G_k	Produção de energia cinética turbulenta por forças de empuxo	[N m ² s]
k_c	Condutividade térmica do ar	[J m ⁻¹ K ⁻¹ s ⁻¹]
h	Entalpia	[J kg ⁻¹]
H	Altura do prédio	[W m ⁻²]
k	Energia cinética turbulenta	[m ² s ⁻²]
l	Escala de comprimento característico	[m]
L	Comprimento de Monin-Obukhov	[m]
L_x	Dimensão do domínio na direção x	[m]
L_y	Dimensão do domínio na direção y	[m]
L_z	Dimensão do domínio na direção z	[m]
P_k	Produção de energia cinética por tensão de cisalhamento	[N m ² s]
p_m	Pressão termodinâmica	[N m ⁻²]
q	Fluxo turbulento de calor por unidade de área	[W m ⁻²]
Re	Número de Reynolds	[]
Ri_{bulk}	Número de Richardson bulk	[]
Ri_f	Número de Richardson fluxo	[]
S_{ij}	Tensor taxa de deformação	[s ⁻¹]
M	Termo de fonte de massa	[kg s ⁻¹ m ⁻³]
t	Tempo	[s]
T_0	Temperatura na superfície	[k]
\bar{u}	Velocidade média na direção longitudinal	[m s ⁻¹]

u_*	Velocidade de fricção	$[m\ s^{-1}]$
u_i	Velocidade instantânea na direção i	$[m\ s^{-1}]$
u_i'	Flutuação de velocidade instantânea na direção i	$[m\ s^{-1}]$
u	Velocidade instantânea na direção x	$[m\ s^{-1}]$
v	Velocidade instantânea na direção y	$[m\ s^{-1}]$
w	Velocidade instantânea na direção z	$[m\ s^{-1}]$

Letras Gregas

		Unidade (SI)
α, α_3	Constantes empíricas	[]
β, β^*, β_3	Constantes empíricas	[]
Δx	Dimensão do elemento na direção x	[m]
Δy	Dimensão do elemento na direção y	[m]
$\Delta \bar{W}$	Variação de velocidade	$[ms^{-1}]$
Δz	Dimensão do elemento na direção z	[m]
$\Delta \bar{\Theta}$	Variação de temperatura potencial média	[K]
κ	Constante de Von-Kàrman	[]
ε	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta	$[m^2\ s^{-3}]$
ω	Taxa de dissipação específica da turbulência	$[s^{-1}]$
ω^*	Fração mássica do composto	$[s^{-1}]$
μ	Viscosidade molecular do fluido	$[m^2s^{-2}]$
μ_{turb}	Viscosidade turbulenta	$[N\ s\ m^{-2}]$
ν	Viscosidade cinemática do fluido	$[m^2s^{-1}]$
ρ	Massa específica	$[kg\ m^{-3}]$
τ_{ij}	Tensor das tensões de Reynolds	$[N\ m^{-2}]$
ϕ	Variável genérica	[]
$\Theta_i^{\theta, lam}$	Fluxo laminar de energia (calor)	$[W\ m^{-2}]$
$\Theta_i^{\theta, turb}$	Fluxo turbulento de energia (calor)	$[W\ m^{-2}]$
$\bar{\Theta}_e$	Temperatura potencial de equilíbrio hidrostático	[K]

Subscritos

i,j,k	Índices de direção da notação de Einstein
∞	Corrente livre
H	Altura do obstáculo

Sobrescritos

$'$	Flutuações turbulentas
$—$	Valores médio-temporais

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
2	OBJETIVOS.....	19
2.1	OBJETIVO GERAL	19
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	19
3	REFERENCIAL TEÓRICO.....	20
3.1	ESCOAMENTOS TURBULENTOS E DISPERSÃO DE POLUENTES AO REDOR DE OBSTÁCULOS ISOLADOS.....	20
3.2	FUNDAMENTOS DE TURBULÊNCIA E SUA MODELAGEM	23
3.2.1	Equações governantes	24
3.2.2	Modelagem da turbulência	26
3.2.3.1	Quantidades médias e o problema do fechamento.....	28
3.2.3	Modelos de viscosidade turbulenta - Fechamento de primeira ordem	32
3.2.3.1	O modelo k- ϵ Padrão	33
3.2.3.2	O modelo k- ω	34
3.2.3.3	O modelo k- ω SST	35
3.3	ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA.....	37
3.4	MÉTODO NÚMÉRICO DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE TRANSPORTE...	41
4	REVISÃO DA LITERATURA	45
4.1	ESCOAMENTOS TURBULENTOS AO REDOR DE OBSTÁCULOS ISOLADOS.....	45
4.2	APLICAÇÃO DO MODELO DE TURBULÊNCIA k- ω SST NA PREDIÇÃO DE ESCOAMENTOS TURBULENTOS E DISPERSÃO DE POLUENTES.....	46
4.3	ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA.....	47
4.4	CONCLUSÃO DA REVISÃO DA LITERATURA.....	49
5	METODOLOGIA	51

5.1	SOLUÇÃO NUMÉRICA DAS EQUAÇÕES DE TRANSPORTE.....	51
5.2	DESCRIÇÃO DAS SIMULAÇÕES NUMÉRICAS ESTUDADAS.....	52
5.2.1	Configuração do experimento em túnel de vento de Murakami et al. (1990) e simulação numérica correspondente	52
5.2.2	Configuração do experimento de campo de Mavroidis et al., (1999) e simulação numérica correspondente	57
5.2.3	Teste de sensibilidade da malha computacional.....	61
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	64
6.1	TESTE DE SENSIBILIDADE DO MODELO DE TURBULÊNCIA $k-\omega$ SST ÀS MODIFICAÇÕES DAS CONSTANTES EMPÍRICAS A_1 E C_{LIM}	64
6.2	ANÁLISE NUMÉRICA DO ESCOAMENTO SEGUNDO ÀS CONDIÇÕES DO EXPERIMENTO EM TÚNEL DE VENTO DE MURAKAMI ET AL. (1990)	77
6.3	DESEMPENHO DO MODELO DE TURBULÊNCIA $k-\omega$ SST PARA QUANTIFICAÇÃO DO DECAIMENTO TEMPORAL DE CONCENTRAÇÃO PARA ATMOSFERA ESTÁVEL E INSTÁVEL	82
7	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	88
7.1	CONCLUSÕES	88
7.2	RECOMENDAÇÕES	90
	REFERÊNCIAS	91

1 INTRODUÇÃO

Os poluentes na atmosfera podem ser emitidos na forma de partículas ou gases e o seu impacto nos receptores (seres humanos, flora, fauna e materiais) resulta dos processos de emissão da fonte, dispersão e deposição. Em regiões urbanas esses processos são alterados pela presença de edificações que são obstáculos ao escoamento, podendo intensificar os níveis de concentração próximos ao solo (TOMINAGA; BLOCKER, 2016; JADIDI et al., 2016).

A maioria dos estudos sobre o escoamento e dispersão de poluentes nas proximidades de obstáculos foi realizada em condições de estabilidade neutra (HARGREAVES et al., 2007; TOMINAGA, 2015; YAN et al., 2016) e mostra que os principais fatores na modificação do escoamento incidente são a forma, orientação e quantidade de obstáculos. Porém, um parâmetro com importantes efeitos nos escoamentos e dispersão ao redor de obstáculos é a variação da estabilidade atmosférica (SANTOS et al., 2009; PONTIGGIA et al., 2009; CHAMUFFO, 2014; MANDEL et al. 2015; CRAWFORD et al., 2016; GARCÍA et al., 2016; CHAMBERS et al., 2016).

A predição do escoamento e dispersão de poluentes em regiões urbanas apresentam grandes desafios, visto que análises experimentais em túnel de vento ou de campo podem ter custo elevado, difícil execução e aplicação limitada. A modelagem matemática surge como um procedimento que tem sido estudado para resolver a problemática da predição do escoamento e dispersão, baseando-se na solução das equações governantes de transporte de massa, *momentum*, energia e espécie química (BLOCKEN, 2014; AI et al., 2015; BALOGH et al., 2015).

O escoamento atmosférico (ventos) incidente sobre as edificações é tipicamente turbulento. A turbulência é caracterizada como um fenômeno complexo; os modelos que a descrevem variam conforme as hipóteses simplificadoras e a acurácia do resultado para representação mais adequada da realidade. As classes de modelos de turbulência são: (i) baseados na decomposição e médias de Reynolds (RANS), (ii) simulação de grandes escalas (LES) e (iii) simulação numérica direta (DNS). A DNS resolve todas as escalas de turbulência (todo o espectro de energia), enquanto a LES resolve as escalas coerentes e possibilita o estudo mais próximo à realidade. Porém, o custo computacional requerido por simulações LES para escoamentos atmosféricos em regime turbulento é elevado. Esta situação é agravada em estudos que

investigam a dispersão de gases ou partículas (GOUSSEAU et al. 2011; GOUSSEAU et al. 2012; AI et al., 2015).

A estratégia de resolução RANS é modelar todas as escalas de turbulência baseando-se nas equações médias de Reynolds. Entretanto, surge o “problema de fechamento” do sistema de equações para determinar os fluxos turbulentos. A analogia de Boussinesq aparece como uma opção para modelar os fluxos turbulentos, mas promove a necessidade da determinação da viscosidade turbulenta. O modelo $k-\omega$ SST (*Shear Stress Transport*) é uma variante do $k-\omega$, que propõe o cálculo da viscosidade turbulenta baseado na energia cinética turbulenta (k) e na taxa de dissipação específica (ω). Essa variante do modelo $k-\omega$ foi elaborada para melhorar a modelagem da viscosidade turbulenta na região próxima às paredes (superfícies sólidas), além da separação do escoamento sob gradientes de pressão adversos. Assim, o modelo $k-\omega$ SST pretende representar melhor os gradientes adversos de pressão, as zonas de separação, e não necessita de tratamento de parede (XING et al., 2013). Entretanto, a revisão da literatura não revelou trabalhos que tenham utilizado o modelo $k-\omega$ SST com o objetivo de modelar a dispersão atmosférica de contaminantes em presença de edificações sob diferentes condições de estabilidade atmosférica.

As condições de estabilidade da atmosfera indicam a capacidade do escoamento em suprimir ou intensificar os movimentos verticais das partículas de fluido (ou parcelas de ar) e dependem da relação entre as forças de inércia e de empuxo térmico. Essas condições podem ser classificadas como estáveis (supressão dos movimentos verticais, devido à importância das forças de inércia), neutras (condições adiabáticas) e instáveis (intensificação dos movimentos verticais devido à turbulência gerada pelo empuxo térmico). A estabilidade pode ser quantificada com base no comprimento de Monin-Obukhov ou no número de Richardson-fluxo, que relacionam a produção de energia cinética turbulenta por tensões cisalhantes e empuxo térmico. Desse modo, a estabilidade da atmosfera influencia substancialmente a dispersão dos poluentes, mas a literatura científica discute a importância relativa da variação das condições de estabilidade atmosférica na dispersão dos poluentes. A presença de obstáculos intensifica a produção de energia cinética turbulenta, devido às tensões cisalhantes geradas (SANTOS, 2000; CEZANA, 2007; BLOCKEN, 2014; ARGYROPOULOS; MARKATOS, 2015). O modelo $k-\omega$ SST, bem como seu predecessor $k-\omega$, apresentam um termo de geração de energia cinética turbulenta por forças de empuxo térmico que permitem incluir os efeitos das trocas de calor do ar atmosférico com a superfície.

A equação para determinação da viscosidade turbulenta e a expressão utilizada para determinar a produção de energia cinética turbulenta no modelo $k-\omega$ SST apresentam constantes empíricas que objetivam, respectivamente, melhorar a previsão próximo à superfície sólida (sem o uso de lei da parede) e evitar a superestimação da produção de energia cinética turbulenta em regiões de estagnação do escoamento. Entretanto, os valores dessas constantes empíricas foram determinados para certos tipos de escoamento e ainda necessitam de verificação quanto à sua generalidade para uso.

Assim, a presente dissertação pretende avaliar o desempenho do modelo de turbulência $k-\omega$ SST para modelar o escoamento e a dispersão de contaminantes ao redor de um obstáculo cúbico, considerando diferentes condições de escoamento e estabilidade atmosférica por meio das comparações com experimentos realizados em túnel de vento por Murakami et al. (1990) e em campo por Mavroidis et al. (1999), além de investigar a influência do uso de diferentes valores de constantes empíricas do modelo no ajuste dos resultados aos dados experimentais. Pretende-se também analisar o desempenho do modelo $k-\omega$ SST para a quantificação do decaimento temporal de concentração de contaminante (ou seja, com a inclusão do termo transiente da equação de conservação de massa da espécie química) por meio da comparação com dados de *experimentos* de campo realizados por Mavroidis et al. (1999).

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

O objetivo geral deste estudo é avaliar o desempenho do modelo de turbulência $k-\omega$ SST (*Shear Stress Transport*) para representar o escoamento e dispersão de gases ao redor de obstáculos cúbicos isolados sob diferentes condições de estabilidade atmosférica.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Avaliar a influência das constantes empíricas do modelo $k-\omega$ SST (a_1 e C_{lim}) na modelagem do escoamento na região da esteira turbulenta de um obstáculo cúbico para número de Reynolds de aproximadamente 7×10^4 sob condições de estabilidade neutra;
- Analisar o desempenho do modelo $k-\omega$ SST para a quantificação do decaimento temporal de concentração de contaminante sob diferentes condições de estabilidade atmosférica (fortemente instável, fortemente estável e estável), por meio da comparação com dados de experimentos de campo realizados por Mavroidis et al. (1999) para número de Reynolds de cerca de 6×10^4 .

3 REFERENCIAL TEÓRICO

No presente capítulo pretende-se apresentar o referencial teórico da pesquisa relacionado aos: (i) escoamentos turbulentos e dispersão de poluentes ao redor de obstáculos isolados, (ii) fundamentos de turbulência e sua modelagem e (iii) estabilidade atmosférica.

3.1 ESCOAMENTOS TURBULENTOS E DISPERSÃO DE POLUENTES AO REDOR DE OBSTÁCULOS ISOLADOS

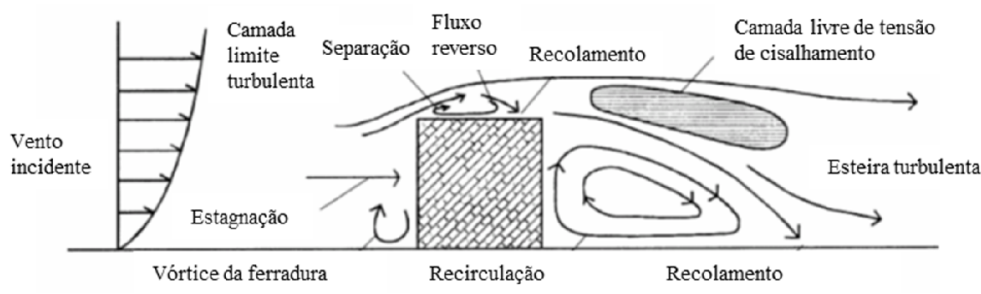
O escoamento ao redor de obstáculos apresenta fenômenos de natureza complexa, com regiões de intensa recirculação e movimentos turbulentos, fortemente tridimensionais e anisotrópicos (MURAKAMI, 1993; PETERKA et al., 1985; DAVIDSON, 2015; JADIDI et al., 2016) representando um grande desafio para modelos matemáticos de descrição da turbulência (SANTOS, 2000; BLOCKEN, 2014).

O escoamento na atmosfera se desenvolve em geral em regime turbulento, principalmente os escoamentos ao redor de obstáculos. A complexidade das estruturas do escoamento ao redor de prédios, geradas pela presença do obstáculo físico podem ser verificadas na Figura 1. Observa-se nessa figura que o escoamento incidente é dividido pela presença do prédio e nesse ponto de divisão ocorre a região de estagnação. Esta é particularmente caracterizada por altos valores de pressão estática e velocidade reduzida. A combinação entre a vorticidade e a distribuição de pressões na parede frontal do prédio resulta na alteração do escoamento, gerando uma região de fluxo descendente próximo ao chão. Consequentemente, a alteração do fluxo conduz à separação do escoamento e geração de um vórtice. Este é desenvolvido nas laterais do prédio e dá origem a uma estrutura conhecida como vórtice da ferradura. O vórtice primário induz à formação de outros menores, que são incorporados ao primário ao longo das laterais do prédio.

No teto e laterais do prédio ocorrem regiões de velocidade negativas que têm sentido contrário à direção principal do escoamento. Um aspecto importante no escoamento ao redor de prédios é o ponto onde as perturbações ao escoamento, impostas pela presença do prédio, deixam de ser importantes; este ponto é chamado recolamento. Ele ocorre de forma distinta no teto e laterais, após o prédio e formam a linha de recolamento. Essa linha define a cavidade de recirculação, que ocorre após o prédio desde a parede posterior. A Figura 1 apresenta diferentes

regiões de escoamento em relação a um obstáculo e exibe uma vista em corte do plano central do escoamento.

Figura 1– Representação esquemática do escoamento ao redor de um prédio cúbico – vista do plano central.

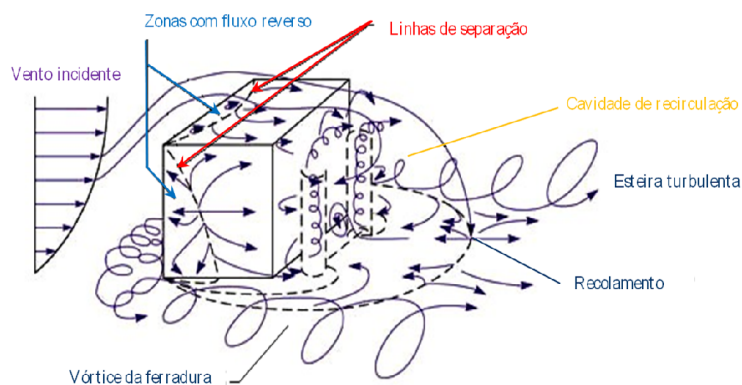


Fonte: Adaptado de Murakami (1993).

A jusante do prédio, o escoamento tende a recuperar as características do perfil de vento incidente. Esse perfil só é restabelecido com o desaparecimento de todas as perturbações causadas pelo prédio. A região mais afastada do prédio, onde ainda persistem alguns efeitos das perturbações, é denominada esteira turbulenta. A variação de pressão na superfície do obstáculo causa esforços dinâmicos que induzem oscilações no escoamento que ocorrem à jusante do prédio. A esteira turbulenta, quando comparada à região do perfil de vento incidente, possui menor velocidade média e maior intensidade de turbulência.

Na Figura 2, pode-se ver em perspectiva uma representação esquemática do escoamento ao redor de um obstáculo cúbico; nela são denominadas as estruturas típicas. Podem-se observar todas as regiões descritas anteriormente: a região do vento incidente, as zonas de fluxo reverso no teto e laterais do prédio, as linhas de separação no teto e paredes laterais, a zona de recirculação atrás do prédio, o vórtice da ferradura e a esteira turbulenta na região mais afastada do prédio.

Figura 2- Estruturas típicas do escoamento ao redor de um obstáculo cúbico – perspectiva tridimensional.



Fonte: Hosker (1980).

O fenômeno da dispersão de poluentes é influenciado pela presença do prédio. O comportamento da dispersão de poluentes na região sob influência do prédio depende da forma do obstáculo, da localização da fonte e das condições meteorológicas. Dependendo da posição de lançamento, a pluma de contaminantes é capturada pela região do escoamento afetada pelo prédio. Quando isso ocorre, a distribuição de concentrações é fortemente alterada.

Para fontes localizadas no teto do prédio, os contaminantes tendem a seguir pela região de fluxo reverso no teto do obstáculo. Nesse tipo de configuração, a pluma é introduzida na zona de recirculação antes de haver espalhamento lateral e vertical.

De acordo com Meroney (1982), quando a fonte de emissão de poluente está localizada à montante do prédio lançada em ponto mais distante do obstáculo, há maior espalhamento antes do prédio, do que quando a fonte está no teto dele. A separação do escoamento se deve à presença do obstáculo que afeta a pluma, sendo ela transportada pelas estruturas que a levam pelo teto e pelas laterais do prédio.

As considerações aqui apresentadas são relativas ao escoamento em atmosfera neutra, onde as forças de empuxo térmico não atuam. A estratificação modifica o padrão da dispersão atmosférica. Para atmosfera instável, a predominância do empuxo térmico aumenta a energia cinética turbulenta e, conseqüentemente, o espalhamento do poluente, enquanto que para atmosfera estável o movimento vertical é suprimido, diminuindo a diluição da pluma.

3.2 FUNDAMENTOS DE TURBULÊNCIA E SUA MODELAGEM

A dispersão de poluentes na atmosfera é um fenômeno predominantemente turbulento. Segundo Hinze (1975), “O movimento turbulento de um fluido é uma condição irregular do escoamento, na qual várias quantidades apresentam uma variação randômica no tempo e espaço, tal que podem ser diferenciados estatisticamente de seus valores médios”.

A turbulência é característica do escoamento e não do fluido. É um fenômeno dissipativo, ou seja, o escoamento turbulento está sempre dissipando energia cinética. Para o escoamento turbulento ser mantido, é necessário haver uma fonte contínua de energia.

Outras características do fenômeno: difusivo, rotacional e tridimensional.

O parâmetro adimensional – que classifica os escoamentos em laminares, transição ou turbulentos – é chamado número de Reynolds (Re_l). Representado na equação 1 indica a relação entre as forças de inércia e as forças viscosas.

$$Re_l = \frac{\rho u l}{\mu} \quad (1)$$

em que u é a velocidade característica, ρ é a massa específica do fluido, l é um comprimento característico e μ é a viscosidade do fluido.

O valor do número de Reynolds que estabelece a passagem do regime laminar para o turbulento é denominado número de Reynolds crítico (Re_{crit}). Esse número é determinado experimentalmente para cada configuração de escoamento. Para valores de Re inferiores ao Re_{crit} , o escoamento se comporta de maneira suave, como se uma camada de fluido deslizesse suavemente sobre a outra, daí o nome escoamento laminar. Ao contrário, quando o número de Re é superior ao Re_{crit} , o escoamento é caracterizado por vórtices turbulentos.

A turbulência é considerada homogênea quando apresenta a mesma estrutura em todas as partes do escoamento, isto é, a homogeneidade da turbulência está relacionada à distribuição das suas propriedades estatísticas no espaço. A turbulência é chamada de isotrópica se as propriedades estatísticas se apresentam iguais em cada direção coordenada. Por outro lado, a turbulência é

chamada anisotrópica quando existe uma direção preferencial: as propriedades não são iguais em todas as direções.

Nesta seção serão apresentadas as equações que governam o fenômeno, os fundamentos de modelagem da turbulência e, por fim, será apresentada a teoria relativa aos modelos de turbulência baseados na viscosidade turbulenta.

3.2.1 Equações governantes

Os fenômenos do escoamento turbulento e dispersão de poluentes sob variadas condições de estratificação térmica da atmosfera são governados por equações diferenciais de conservação. As propriedades conservadas investigadas no presente estudo são: (i) massa, (ii) quantidade de movimento, (iii) energia e (iv) espécie química.

Equação de conservação da massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2)$$

onde t representa o tempo [s]; ρ é a massa específica do fluido [kg m^{-3}]; u_i é a componente instantânea da velocidade na direção i [m s^{-1}]; x_i identifica a coordenada na direção i [m].

Na equação da conservação da massa ou equação da continuidade, a descrição matemática representa o balanço de massa ao longo de um volume de controle diferencial. Os termos da equação mostram, respectivamente, a variação com o tempo da massa no volume de controle e o fluxo líquido de massa através da superfície de controle do volume de controle.

Equação da conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho \delta_{3i} g \quad (3)$$

Na equação da conservação da quantidade de movimento ou equação do *momentum*, a descrição matemática representa o balanço de quantidade de movimento ao longo de um volume de controle diferencial. Os termos da equação mostram, respectivamente: a variação com o tempo da quantidade de movimento no volume de controle, o transporte advectivo de *momentum* para o escoamento médio, o transporte advectivo das tensões normais e as forças tangenciais que atuam no volume de controle.

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \left(p + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (4)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (5)$$

onde: δ_{ij} , δ_{3i} representam o Delta de Kronecker; g é a aceleração da gravidade [$m\ s^{-2}$]; p - Pressão termodinâmica [$N\ m^{-2}$]; τ_{ij} - tensor das tensões [$N\ m^{-2}$]; μ - viscosidade molecular do fluido [$kg\ m^{-1}\ s^{-1}$]; S_{ij} - tensor taxa de deformação [s^{-1}].

Equação de conservação da energia:

$$\frac{\partial(\theta)}{\partial t} + \frac{\partial(u_i \theta)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{k_c}{c_p \rho} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \right) \quad (6)$$

onde: θ representa a temperatura potencial [K]; c_p - calor específico à pressão constante [$J\ kg^{-1}\ K^{-1}$]; k_c - Condutividade térmica do ar [$J\ m^{-1}\ K^{-1}\ s^{-1}$].

Na equação da conservação da energia, a descrição matemática representa o balanço de energia ao longo de um volume de controle diferencial. Os termos da equação mostram, respectivamente: a variação da temperatura com o tempo no volume de controle, o transporte advectivo de energia para o escoamento médio, o transporte advectivo de energia para o fluxo turbulento e o transporte difusivo de energia.

A equaç

Equação de conservação de massa da espécie química para gás perfeito:

$$\frac{\partial(\rho\omega^*)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \omega^*)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_m \frac{\partial \omega^*}{\partial x_i} \right) + M \quad (7)$$

onde: ω^* representa a fração mássica do composto em $[\text{kg kg}^{-1}]$; M – termo de fonte de massa $[\text{kg s}^{-1} \text{m}^{-3}]$.

Na equação conservação de massa da espécie química, a descrição matemática representa o balanço das espécies químicas ao longo de um volume de controle diferencial. Os termos da equação mostram, respectivamente: a variação com o tempo da espécie química no volume de controle, o transporte advectivo do escalar, o transporte difusivo da espécie química e o termo fonte, geração ou remoção da espécie química.

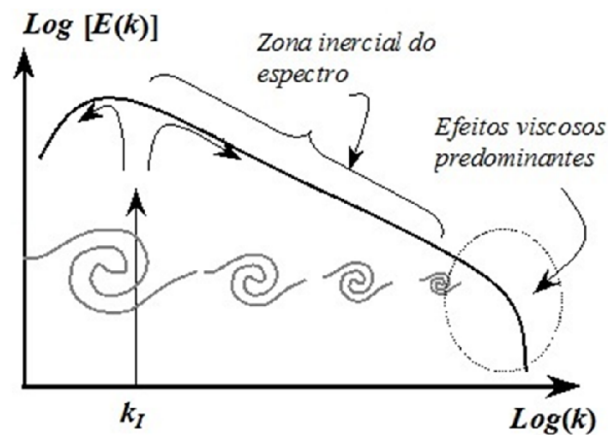
3.2.2 Modelagem da turbulência

A turbulência é caracterizada pela irregularidade do escoamento, alta difusividade, flutuações tridimensionais de vorticidade e por ser um fenômeno altamente dissipativo. A turbulência pode ser considerada determinística para as estruturas coerentes, que são estruturas turbilhonares bem organizadas nas grandes escalas e randômicas para as pequenas estruturas. Essas e outras características tornam imprevisível o escoamento turbulento de comportamento.

O campo turbulento de velocidades pode ser representado por diferentes tamanhos de turbilhões. A energia entra no sistema produzindo grandes turbilhões. A teoria de Kolmogorov (1941) baseia-se na hipótese de que os grandes turbilhões fornecem energia para os menores e estes, por sua vez, transferem energia para os turbilhões menores ainda. Esse processo resulta em uma transferência de energia na forma de cascata dos maiores para os menores. Os vórtices de menores dimensões tendem a dissipar as flutuações turbulentas com a viscosidade. A Figura 3 mostra o espectro de Energia Cinética Turbulenta (ECT) em função do número de onda, grandeza física inversamente proporcional ao comprimento da onda. Os turbilhões maiores (estruturas coerentes) representam cerca de 20% da ECT, são anisotrópicos e possuem um

tempo de vida maior. A zona inercial do espectro representa a maior parcela de ECT do espectro de energia. Os efeitos viscosos predominam entre os menores turbilhões: quanto menor o comprimento de onda, maior a dissipação por efeitos viscosos.

Figura 3- Espectro Energia Cinética Turbulenta em função do número de onda.



Fonte: Silveira Neto (2002).

São três as classes de modelos matemáticos para descrever escoamentos turbulentos:

- Simulação Numérica Direta do inglês DNS, *Direct Numerical Simulation*: a DNS resolve diretamente a partir das equações de conservação todas as escalas da turbulência;
- Modelos baseados nas Equações Médias de Reynolds do inglês RANS, *Reynolds Averaged Navier-Stokes*: modela todas as escalas da turbulência, baseando-se nas equações médias de Reynolds;
- Simulação de Grandes Escalas do inglês LES, *large Eddy Simulation*: simula diretamente as grandes escalas e modela as pequenas escalas do escoamento turbulento.

Os modelos mais complexos exigem alto desempenho computacional para solução do escoamento. A modelagem LES e a DNS buscam informações instantâneas acerca do escoamento e assim maior será o tempo de simulação necessário. Comparativamente à simulação numérica direta (DNS) que captura todas as frequências de energia, a LES obtém apenas parte do espectro de energia. O tempo de simulação está diretamente associado à instabilidade física: quanto menor a instabilidade, mais refinada deverá ser a malha de simulação e, portanto, mais onerosa e demorada. O modelo RANS apresenta menor custo computacional e menor tempo de simulação que a DNS e a LES.

As equações RANS são definidas por meio de um conjunto de médias das equações de *Navier-Stokes* e da continuidade em que as grandezas estatísticas de interesse são valores médios sobre todas as escalas de comprimento. O fator crítico dessa técnica é a reprodução das tensões turbulentas que descrevem os efeitos resultantes das flutuações de pressão e velocidades (GEORGE, 2013).

3.2.3.1 Quantidades médias e o problema do fechamento

Aplicando o conceito da decomposição de Reynolds às equações de *Navier-Stokes* obtêm-se as equações para as variáveis médias do escoamento. Essa decomposição propõe que os valores instantâneos das variáveis dos escoamentos turbulentos se comportam como uma variação randômica em torno dos valores médios. Assim, para a equação de decomposição de Reynolds, o valor instantâneo de qualquer variável escalar genérica Φ se torna:

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (8)$$

A barra sobre a variável denota o valor médio e a aspa denota a flutuação instantânea em torno da média.

Pela própria definição da decomposição de Reynolds anteriormente descrita, pode-se afirmar que a média das flutuações é nula. Então:

$$\bar{\Phi}' = 0 \quad (9)$$

Assumindo-se escoamento permanente e incompressível, as equações de conservação em termos de quantidades médias são apresentadas abaixo com propriedades μ_{lam} , k_c , c_p e D_m constantes. A dissipação viscosa na equação de conservação da energia é negligenciada e não existe fonte de energia.

A aproximação de Boussinesq permite assumir que a densidade seja apenas uma função da temperatura e a influência da variação da densidade somente é importante nos termos de

empuxo da equação de *Momentum*. Consequentemente, a densidade pode ser considerada constante e igual a ρ_0 (valor de referência). Então o termo $-\rho g$ na equação 2 (*Momentum*) é substituído por $\delta\bar{p}g$, onde $\delta\bar{p}$ indica a variação da densidade em relação ao estado de referência:

$$\delta\bar{p} = \bar{p} - \rho_0 \quad (10)$$

Equação de conservação da massa:

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (11)$$

Equação da conservação da quantidade de movimento:

$$\frac{\partial(\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_i} = \frac{\partial(\tau_{ij}^{lam})}{\partial x_j} - \frac{\partial(\tau_{ij}^{turb})}{\partial x_i} - \frac{\delta\bar{p}}{\rho_0} g \delta_{3i} \quad (12)$$

onde:

$$\tau_{ij}^{lam} = - \left(\frac{\bar{p}}{\rho_0} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{\rho_0} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} + 2 \frac{\mu}{\rho_0} S_{ij} \quad (13)$$

$$\tau_{ij}^{turb} = - \overline{u_i' u_j'} \rho_0$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (14)$$

Equação de conservação da energia:

$$\frac{\partial(\bar{u}_i \bar{\theta})}{\partial x_i} + \frac{\partial(\overline{u_i' \theta'})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{k_c}{c_p \rho_0} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} \right) \quad (15)$$

onde:

$$\frac{k_c}{c_p \rho_0} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_i} = \Theta_i^{\theta, \text{lam}} \quad (16)$$

$$-\overline{u_i' \theta'} = \frac{\Theta_i^{\theta, \text{turb}}}{c_p \rho_0} \quad (17)$$

Equação de conservação da espécie química:

$$\frac{\partial(\bar{c})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i \bar{c})}{\partial x_i} + \frac{\partial(\overline{u_i' c'})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{D_m}{\rho_0} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right) + \frac{M}{\rho_0} \quad (18)$$

onde:

$$\frac{D_m}{\rho_0} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = \Theta_i^{\omega, \text{lam}} \quad (19)$$

$$-\overline{u_i' c'} = \frac{\Theta_i^{\omega, \text{turb}}}{c_p \rho_0} \quad (20)$$

Os termos adicionais que aparecem nas equações de quantidade de movimento e das variáveis escalares (τ_{ij}^{turb} , $\Theta_i^{\theta, turb}$ e $\Theta_i^{\omega, turb}$) são conhecidos como fluxos turbulentos. O fluxo turbulento da equação de conservação da quantidade de movimento τ_{ij} é denominado tensor das tensões de Reynolds.

Na forma matricial possui a seguinte forma:

$$\tau_{ij} = \begin{bmatrix} \overline{u_1' u_1'} & \overline{u_1' u_2'} & \overline{u_1' u_3'} \\ \overline{u_2' u_1'} & \overline{u_2' u_2'} & \overline{u_2' u_3'} \\ \overline{u_3' u_1'} & \overline{u_3' u_2'} & \overline{u_3' u_3'} \end{bmatrix} \quad (21)$$

$$\Theta_i^{\omega, \text{turb}} = \begin{bmatrix} \overline{u_1' c'} \\ \overline{u_2' c'} \\ \overline{u_3' c'} \end{bmatrix} \quad (22)$$

$$\Theta_i^{\theta, \text{turb}} = \begin{bmatrix} \overline{u_1' \theta'} \\ \overline{u_2' \theta'} \\ \overline{u_3' \theta'} \end{bmatrix} \quad (23)$$

No tensor de Reynolds, os elementos da diagonal principal ($i=j$) representam os componentes de tensão normal e os elementos fora da diagonal representam as tensões cisalhantes. O processo de tomada da média de Reynolds nas equações de conservação faz, portanto, aparecerem correlações envolvendo flutuações da velocidade na equação do movimento médio. Dessa forma, o problema da modelagem da turbulência é reduzido ao cálculo do tensor das tensões de Reynolds e dos outros fluxos turbulentos.

Após a integração das equações médias de Reynolds, existem mais variáveis do que equações. As equações para todas as quantidades físicas principais – tais como velocidade, concentração e energia – são definidas, mas não existem equações para os fluxos turbulentos. É, então, necessário, providenciar um novo conjunto de equações que relacione as grandezas médias às grandezas instantâneas. Esse procedimento de obtenção de novas relações funcionais que completem a formulação do problema é chamado, em turbulência, de “problema do fechamento”. Dessa forma, torna-se necessário utilizar apenas um número finito de equações e aproximar as variáveis desconhecidas em termos de quantidades conhecidas. Quando os termos de segunda ordem são aproximados através de valores calculados das primeiras equações, o fechamento é denominado de primeira ordem.

Existem várias formas de modelar os termos que surgem da integração proposta pelas equações médias de Reynolds. Os modelos que são apresentados a seguir diferem justamente no tratamento dado aos termos relacionados à turbulência. É importante ressaltar que os fluxos turbulentos de temperatura e concentração são resolvidos através da viscosidade turbulenta.

3.2.3 Modelos de viscosidade turbulenta - Fechamento de primeira ordem

A forma mais simples de se definir o problema do fechamento da turbulência é considerar que os fenômenos de transferência de quantidade de movimento molecular e turbulento se processem de modo análogo. No processo de difusão molecular, a transferência de quantidade de movimento entre partículas de fluido se dá através do movimento de moléculas entre as partículas de fluido. Já no processo de difusão turbulenta, a transferência da quantidade de movimento entre as diferentes posições do escoamento se dá através de estruturas turbilhonares.

Esta abordagem, sugerida por Boussinesq em 1877, propôs que o fluxo turbulento de quantidade de movimento está relacionado ao gradiente local de velocidades do escoamento médio através de uma viscosidade associada às características do fluido, do escoamento e da geometria envolvida no problema sob consideração (SILVEIRA NETO, 2002):

$$\tau_{ij}^{\text{turb}} = \mu_{\text{turb}} \overline{S_{ij}} \quad (24)$$

Com uso da analogia de Boussinesq, apenas uma equação para o cálculo da viscosidade turbulenta é inserida. Assim, não é necessário introduzir seis equações suplementares para calcular separadamente cada componente do Tensor de Reynolds.

Os modelos algébricos, os modelos de uma equação diferencial e de duas equações diferenciais são as três principais categorias de modelos de viscosidade turbulenta. Os modelos algébricos, ou modelos de zero equação diferencial, utilizam uma especificação algébrica para o comprimento característico e a velocidade, que está relacionada com as propriedades geométricas existentes e com o fluxo médio (ARAÚJO, 2012).

Os modelos de uma equação resolvem somente uma equação diferencial parcial que prediz o transporte de uma única escala turbulenta, usada comumente no cálculo da viscosidade turbulenta em conjunto com uma segunda escala, que é resolvida empregando-se relações algébricas. No caso dos modelos de duas equações diferenciais, a segunda escala de turbulência também é resolvida usando-se uma segunda equação diferencial parcial (REZENDE, 2009).

Há ainda modelos de viscosidade turbulenta de 7 equações (*Reynolds Stress*, por exemplo) que são mais complexos e demandam um maior custo computacional. Este estudo tem enfoque em modelo de viscosidade turbulenta de duas equações, que são assim chamados porque se utilizam de duas equações de transporte: uma para calcular a energia cinética turbulenta (k) e outra para o comprimento de escala da turbulência (l). Na equação para cálculo de l , a variável dependente pode ser o comprimento l ou uma função de k e l .

3.2.3.1 O modelo k- ϵ Padrão

O modelo k- ϵ Padrão foi desenvolvido por Jones e Launder (1972). As constantes do modelo foram aprimoradas por Launder e Sharma (1974). Ao longo dos anos, diversos estudos foram apresentados no sentido de ampliar a generalidade e a sua precisão (CEZANA, 2007).

O conceito básico do modelo k- ϵ consiste em determinar a viscosidade turbulenta com base na energia cinética turbulenta e na dissipação de energia cinética turbulenta.

$$\mu_{\text{turb}} = \frac{C_\mu \rho k^2}{\epsilon} \quad (25)$$

onde: k é a energia cinética turbulenta, ϵ é a dissipação da energia cinética turbulenta e C_μ é constante empírica do modelo.

Para determinar os valores da energia cinética turbulenta (k) e da dissipação da energia cinética turbulenta (ϵ) são resolvidas duas equações diferenciais adicionais:

$$\frac{\partial(\bar{u}_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_{\text{turb}}}{\rho \sigma_k} \right) \frac{\partial(k)}{\partial x_j} \right] + P_k + G_k - \epsilon \quad (26)$$

$$\frac{\partial(\bar{u}_j \epsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_{\text{turb}}}{\rho \sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\epsilon}{k} (C_1 P_k + C_3 G_k) - C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \quad (27)$$

onde:

$$P_k = -\overline{u_i' u_j'} \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} = \frac{\mu_{\text{turb}}}{\rho} \left(\frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_j}}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \overline{U_i}}{\partial x_j} \quad (28)$$

$$G_k = \beta g \delta_{3i} \overline{u_i' T'} = \frac{\mu_{\text{turb}}}{\rho \sigma_t} g \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} \quad (29)$$

$$\varepsilon = \frac{\mu}{\rho} \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} \quad (30)$$

P_k representa a produção de energia cinética turbulenta por tensão de cisalhamento; G_k é a produção de energia cinética por forças de empuxo; ε é a taxa de dissipação de energia cinética; $C_1, C_2, C_3, \sigma_\varepsilon, \sigma_k$ e σ_t são constantes empíricas para o modelo k- ε padrão.

Assim, no modelo de turbulência k- ε , as escalas de comprimento e tempo têm sua formulação a partir da energia cinética e dissipação dos turbilhões. Pode-se relacionar como desvantagem a maior dificuldade do modelo: a representação de escoamentos sujeitos a gradientes adversos de pressão, superestimando a tensão de cisalhamento. Outra desvantagem é a necessidade de modificação nas regiões próximas de parede para determinar o escoamento próximo à parede onde as forças viscosas dissipam os vórtices turbulentos (RONG et al., 2010; SANTOS et al., 2009).

3.2.3.2 O modelo k- ω

Além do modelo k- ε padrão, a literatura descreve o modelo k- ω , em que viscosidade turbulenta é calculada como uma função de k e a taxa de dissipação específica ω , como apresentado na Equação que segue:

$$\mu_{\text{turb}} = \alpha^* \rho \frac{k}{\omega} \quad (31)$$

onde α^* é calculado em função do Número de Reynolds.

Este modelo é baseado na relação entre k , ω e o comprimento característico (l), inicialmente definido por Kolmogorov:

$$\omega = \frac{Ck^{\frac{1}{2}}}{l} \quad (32)$$

onde C é constante. As equações que seguem representam a formulação das equações de transporte para o modelo k - ω :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k - \beta^* k \omega Y_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(v + \sigma_k v_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (33)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \alpha S^2 - \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(v + \sigma_\omega v_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \quad (34)$$

onde P_k é a produção de energia cinética turbulenta por tensão de cisalhamento e ω é a taxa de dissipação.

Menter (1994) relatou que o modelo k - ω apresenta resultados mais precisos do que o modelo k - ϵ para escoamentos compressíveis e com gradientes adversos de pressão. Este modelo se adapta melhor aos escoamentos complexos e na região próxima à parede apresentam resultados mais precisos. Segundo Furieri (2012), este modelo é fortemente dependente do refinamento da malha perto da parede.

3.2.3.3 O modelo k - ω SST

Uma variante do modelo k - ω é o modelo k - ω SST (*Shear Stress Transport*), desenvolvido por Menter (1994). O modelo k - ω SST foi projetado para dar maior precisão às previsões de

separação de escoamento sob gradientes adversos de pressão, incluindo os efeitos de transporte introduzidos de viscosidade turbulenta. Esse modelo inclui duas alterações:

- A viscosidade turbulenta é modificada de acordo com a (35, que representa melhor os efeitos de transporte de tensão cisalhante e assim permite resolver um número maior de problemas do que os resolvidos pelo modelo k- ϵ .
- A adição de um termo na equação (37 da difusão ω e uma função específica que permite a validade das equações nas zonas próximas à parede ou distantes. Estes dois modelos de k- ω são usados para número de Reynolds baixos e altos.

$$v_T = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)} \quad (35)$$

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k - \beta^* K \omega Y_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(v + \sigma_k v_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (36)$$

$$\frac{\partial (\omega)}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \alpha S^2 - \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(v + \sigma_\omega v_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F_1) \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \quad (37)$$

onde os coeficientes e relações auxiliares são dados por:

$$F_2 = \tanh \left[\left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500v}{y^2 \omega} \right) \right]^2 \right] \quad (38)$$

$$P_k = \min \left(\tau_{ij} \frac{\delta U_i}{\partial x_j}, 10 \beta^* k y \right) \quad (39)$$

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500v}{y^2 \omega} \right), \frac{4\sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} y^2} \right] \right\}^4 \right\} \quad (40)$$

Cada modelo de viscosidade turbulenta apresenta especificidades que o tornam aplicáveis ou não para cada situação. O modelo k- ϵ , por exemplo, apresenta resultados ótimos em pontos distantes da região de parede. Já o modelo k- ω apresenta resultados satisfatórios próximo à

parede. As especificidades de cada modelo e a compreensão das características de cada um deles se deram a partir de estudos comparativos em várias aplicações de dispersão de compostos gasosos ao redor de obstáculos.

O modelo $k-\omega$ SST utiliza critérios para a definição de qual viscosidade turbulenta será utilizada em cada volume de controle, de modo que, nas regiões mais próximas à parede, o modelo $k-\omega$ é utilizado, enquanto que nas regiões mais distantes da parede o modelo $k-\epsilon$, através do termo de difusão cruzada, é inserido na equação de taxa de dissipação específica.

Os modelos de turbulência de duas equações apresentam a desvantagem de representar excessivamente a geração de turbulência na vizinhança dos pontos de estagnação. Esta função foi criada com a finalidade de controlar a produção de energia cinética turbulenta nas regiões de estagnação, como as regiões frontal e laterais do obstáculo.

Esta formulação de limitadores para a produção de energia cinética turbulenta por cisalhamento (P_k) é apresentada a seguir:

$$P_k = \min(P_k, C_{lim} \rho \epsilon) \quad (41)$$

C_{lim} é definido como “*Clip Factor*” e tem valor igual a 10 para modelos baseados nas equações de ω , de acordo com testes anteriormente realizados por Valger et al. (2015).

3.3 ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA

A estabilidade atmosférica classifica a atmosfera de acordo com a estratificação térmica, que age na supressão ou amplificação dos movimentos verticais das parcelas de ar (MOHAN; SIDDIQUI, 1998), e pode ser determinada comparando-se o perfil real de temperatura com o perfil adiabático. A variação da temperatura com a altura para uma parcela descendente de ar seco deslocando-se adiabaticamente é uma propriedade básica da atmosfera. Esta relação para

variação da temperatura é importante, pois serve como um perfil de temperatura de referência para comparação com todos os perfis reais de temperatura (SEINFELD; PANDIS, 2006).

$$\frac{dT}{dz} = \frac{-g}{c_p} \quad (42)$$

onde c_p é o calor específico à pressão constante do ar e g é o módulo da aceleração gravitacional.

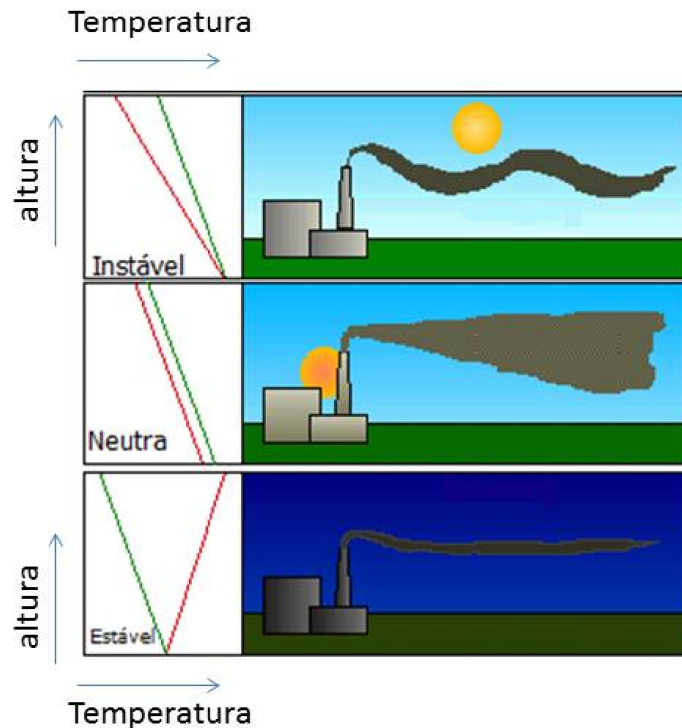
Quando o movimento vertical de uma parcela de ar é suficientemente rápido, podendo ser desprezada a troca de calor entre ela e a atmosfera circundante, o processo é considerado adiabático. Quando um perfil de temperatura como este ocorre na CLP, a atmosfera encontra-se em condições neutras e, nestas condições, o empuxo não possui contribuição na amplificação ou supressão dos movimentos.

Contudo, raramente a atmosfera encontra-se nesta condição de equilíbrio, pois as trocas de calor com a superfície e fenômenos de larga escala geralmente resultam em perfis de temperatura diferentes do perfil de temperatura neutro. Entretanto, este perfil é utilizado como referência. A atmosfera será considerada como instável, se a temperatura diminui com a altura a uma taxa maior que a neutra, ou seja, se uma parcela de ar for deslocada de sua posição original para cima ou para baixo, continuará a mover-se no sentido para o qual foi deslocada.

Caso a temperatura esteja aumentando com a altura, a atmosfera é considerada estável. Logo, se uma parcela de ar for deslocada de sua posição original, terá seu movimento inibido e tenderá a retornar a sua posição inicial. Portanto, em condições de atmosfera instável, os movimentos na direção vertical são estimulados por forças de empuxo e, em condições de atmosfera estável, estes movimentos são inibidos pela ausência das forças de empuxo (CEZANA, 2007). Daí a relevância em identificar a classe de estabilidade atmosférica.

A Figura 4 exibe o comportamento esquemático da pluma em relação aos diferentes perfis de temperatura. A variação da temperatura na superfície terrestre apresenta variação ao longo ciclo diário influenciando diretamente na estabilidade térmica. O aquecimento solar da superfície transfere calor às camadas de ar adjacentes e intensifica a produção de energia cinética turbulenta. Já no período noturno o resfriamento da superfície e níveis menores de energia cinética e atmosfera estável reduzem significativamente esses efeitos.

Figura 4—Perfis de temperatura e condições de estabilidade atmosférica.



Fonte: Adaptado de Arya (1999)

A estratificação térmica do ar atmosférico pode ser especificada em termos da diferença entre o perfil vertical real de temperatura e o perfil adiabático ($-0,98^{\circ}\text{C}/100\text{m}$) que define os perfis verticais de temperatura potencial (θ). Assim, a variação da temperatura devido o gradiente vertical de pressão é removido da descrição matemática.

A equação de conservação de energia pode ser escrita em termos da temperatura potencial. É importante mudar as variáveis porque a dispersão em condição atmosférica neutra pode ser simulada sem que a equação de conservação de energia seja resolvida devido ao fato de $\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} = 0$.

Camada superficial é a camada que é afetada pela interação entre o ar e as superfícies sólidas. A tensão cisalhante (τ_0) e o fluxo de calor vertical (q) são considerados constantes na camada superficial. Monin e Obukhov propuseram, em 1954, a teoria de similaridade para a camada superficial da atmosfera. A teoria define dois parâmetros de escala independente da altura da camada superficial. A velocidade de fricção (u_*) e o comprimento de Monin-Obukhov (L) definidos a seguir:

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (43)$$

$$L = \frac{-\rho c_p T_0 u_*^3}{\kappa g q} \quad (44)$$

onde: L - Comprimento de Monin-Obukhov; q - Fluxo de calor turbulento na superfície por unidade de área; u_* - Velocidade de fricção; ρ - Densidade do ar; c_p - Calor específico à pressão constante; κ - Constante de Von-Karman; T_0 - Temperatura na superfície; g - aceleração da gravidade.

Por definição, o comprimento Monin-Obukov é a altura em que a produção de turbulência, devido ao cisalhamento mecânico e ao empuxo térmico são iguais. Para desenvolvimento da teoria de Monin-Obukov, a tensão de cisalhamento e o fluxo de calor são considerados constantes na camada superficial.

O número de Richardson (Ri_f) relaciona a produção de energia cinética térmica e a turbulência mecânica, devido às tensões cisalhantes e pode ser expresso pela equação (45) (SEINFELD; PANDIS, 2006):

$$Ri_f = \frac{-\kappa g x_3 q}{\rho c_p T_0 u_*^3} \quad (45)$$

onde: κ – Constante de Von-Kàrman; q- Fluxo de calor por unidade de área; u_* - Velocidade de fricção; ρ – Densidade do ar; c_p - Calor específico à pressão constante; x_3 - Coordenada vertical; T_0 - Temperatura na superfície.

Segundo Stull (2001), a atmosfera é instável, se $Ri_f < 0$. A atmosfera é neutra, se $Ri_f = 0$. A atmosfera é estável, se $Ri_f > 0$. O valor de $Ri_f = 1$ é considerado crítico, pois a taxa de produção da energia cinética turbulenta por forças mecânicas equilibra-se com o consumo da energia cinética turbulenta por forças de empuxo. Para $Ri_f > 1$, os efeitos da estratificação são dominantes sobre a geração de turbulência por forças mecânicas, havendo uma forte redução dos níveis de turbulência (tendência de laminarização). Assim o espalhamento de poluentes

será menos significativa. Por outro lado, se $R_{if} < 1$, os efeitos supressores da estratificação não são suficientes para afetar a turbulência por forças mecânicas. A Tabela 1 relaciona o Comprimento de Monin-Obukhov com a estabilidade atmosférica.

Tabela 1 - Comprimento de Monin-Obukhov em relação às classes de estabilidade atmosférica.

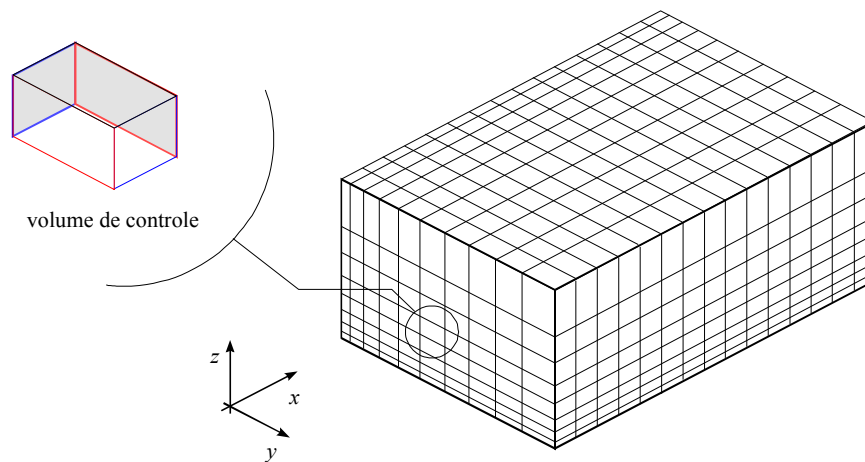
Classe de estabilidade	Comprimento de Monin-Obukhov (m)
Muito instável	$-100 < L < 0$
Instável	$-10^5 < L < -100$
Neutra	$ L > 10^5$
Estável	$10 < L < 10^5$
Muito estável	$0 < L < 10$

Fonte: Seinfeld (2006)

3.4 MÉTODO NÚMÉRICO DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE TRANSPORTE

O Método dos Volumes Finitos (MVF) permite resolver as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e da espécie química. O MVF envolve a divisão do domínio computacional em volumes de controle, conforme apresentado na figura 5 e as equações diferenciais parciais são discretizadas e integradas ao longo de cada volume de controle. Especificamente, a Figura 5 mostra o exemplo de uma malha computacional estruturada com refinamento na parte inferior do domínio computacional. O presente método numérico permite a análise de escoamentos em geometrias complexas, utilizando malhas estruturadas e não estruturadas.

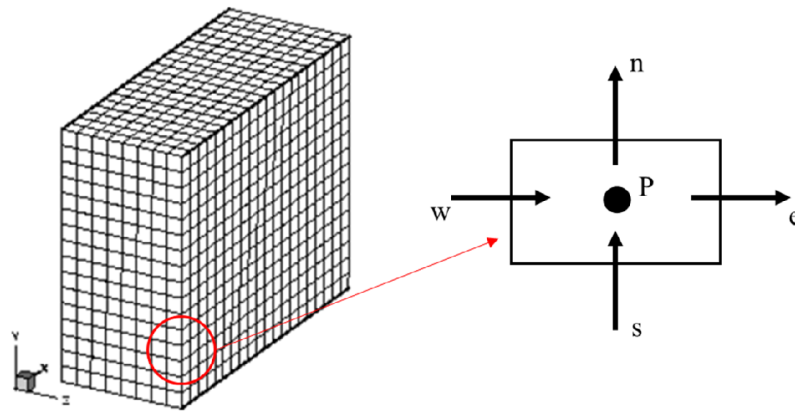
Figura 5– Representação esquemática do domínio computacional dividido em volumes de controle



Fonte: Adaptado de Santos (2000).

A Figura 6 representa tipicamente um volume de controle na malha de um domínio computacional. O ponto nodal ou nó é cercado por um conjunto de superfícies que determinam o volume de controle. As equações governantes são integradas ao longo de cada volume de controle, de maneira que as quantidades de interesse (massa, energia, quantidade de movimento ou espécie química) sejam conservadas em cada volume de controle. Variáveis, como pressão e concentração, têm seus valores calculados nos pontos nodais (P). Já as grandezas vetoriais, como a velocidade, têm seus valores calculados nas faces dos volumes de controle. Uma descrição completa do método dos volumes finitos é apresentada por Patankar (1980), Versteeg e Malalasekera (2007) e Maliska (2004).

Figura 6– Representação da discretização do domínio computacional através da técnica dos volumes finitos.



As equações de conservação da quantidade de movimento são discretizadas da mesma forma que as equações das outras variáveis de interesse. Entretanto, os termos convectivos das equações de conservação de quantidades de movimento possuem quantidades não lineares, ou seja, os coeficientes das equações discretizadas para u , v e w dependem dos valores de u , v e w , por isto um processo iterativo é necessário. Outro ponto é que o campo de velocidades é extremamente dependente do campo de pressões, que é desconhecido. A estratégia de solução iterativa utilizada é chamada SIMPLEC.

O algoritmo SIMPLEC (SIMPLE-Consistent), desenvolvido por Van Doormal e Raithby (1984), implica na utilização de uma técnica de solução iterativa, com a inserção de mais uma equação, baseada na equação da continuidade. O SIMPLEC é baseado no algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*), descrito por Patankar e Spalding (1980). O algoritmo é baseado na hipótese de que a velocidade obtida pela solução da equação de conservação da quantidade de movimento só irá satisfazer a equação de conservação de massa se o campo de pressão estiver correto, sendo necessário corrigir tanto a velocidade como a pressão. Esta relação é conhecida como acoplamento pressão-velocidade.

O procedimento de discretização gera um conjunto de equações algébricas a ser resolvido por um algoritmo de solução de sistemas lineares. O conjunto de equações lineares que surgem a partir da aplicação do método dos volumes finitos, para cada volume de controle do domínio, são equações de conservação na forma discreta. O sistema de equações empregadas neste método é descrito da seguinte forma:

$$\sum_{nb_i} a_i^{nb} \Phi_i = b_i \quad (46)$$

onde: Φ é a solução; b é o valor do lado direito de cada equação; a os coeficientes da equação; i identifica o número do volume finito ou nó em questão; nb vizinhança ou *neighbour*. O nó deve ter algum número em relação a tais vizinhanças, para que o método seja aplicável para malhas estruturadas ou não estruturadas.

Para uma equação acoplada tridimensional de massa e *momentum* cada a_i^{nb} e b_i , estas variáveis são representadas na forma matricial. A vantagem do acoplamento das equações está relacionada com a maior robustez e eficiência na solução do problema.

4 REVISÃO DA LITERATURA

O presente capítulo objetiva apresentar os principais trabalhos científicos correlatos ao tema investigado nesta dissertação. Efetuou-se busca dentre as mais conceituadas revistas científicas das áreas de conhecimento para mostrar a evolução do assunto ao longo do tempo. Espera-se, ao fim desta revisão da literatura, conhecer o que de mais interessante foi realizado, publicado e quais lacunas foram deixadas sem resposta.

4.1 ESCOAMENTOS TURBULENTOS AO REDOR DE OBSTÁCULOS ISOLADOS

Uma extensa revisão da literatura até 2000 pode ser encontrada em Santos (2000).

Mavroidis et al. (2003) estudaram a dispersão na esteira turbulenta próximo a obstáculos cúbicos isolados. Os experimentos realizados em túnel de vento mostraram que a altura do obstáculo influenciou significativamente na concentração próximo ao solo.

Mavroidis et al. (2007) apresentam simulações computacionais de experimentos de dispersão atmosférica realizadas em torno de obstáculos isolados dos experimentos realizados por Mavroidis et al. (2003). O modelo computacional utilizado para as simulações foi o código Adrea-HF. Neste estudo, uma equação do modelo k-l e do modelo k- ϵ foi utilizada para fins de comparação. Uma equação tridimensional de transporte é resolvida, similar em forma para a equação da energia cinética turbulenta k. Para este estudo, o domínio foi definido até a distância $5,4H \times 10,7H \times 7,6H$ em x, y e z, respectivamente.

Mak et al. (2013) estudaram o efeito da camada limite atmosférica não homogênea e o tratamento na região próxima à parede para um obstáculo isolado com utilização de simulação numérica computacional. É utilizado o modelo k- ϵ . Verifica-se no estudo que o estabelecimento preciso do campo de turbulência é importante para a previsão correta do escoamento e dispersão.

Mak et al. (2014) analisaram características de dispersão entre edifícios e em torno de um prédio de vários andares, em condições de ventilação de um só lado, induzidas pelo vento, utilizando dinâmica computacional dos fluidos. É utilizada a técnica do gás marcador para simular a dispersão do poluente. O estudo conclui que, sob a incidência na direção normal ($\theta = 0^\circ$), o

poluente dispersa principalmente para baixo, no lado à barlavento, e principalmente para cima, sobre sotavento.

Lateb et al. (2016) apresentam o estado da arte de estudos experimentais e numéricos realizados sobre a dispersão atmosférica em ambientes urbanos. Mostra-se que a simulação do campo de dispersão é fortemente dependente da simulação correta das estruturas de fluxo de vento, apresentadas na Figura 2, e apresenta potencial fonte de erros quando estas estruturas não são corretamente representadas pelo modelo computacional utilizado.

4.2 APLICAÇÃO DO MODELO DE TURBULÊNCIA $k-\omega$ SST NA PREDIÇÃO DE ESCOAMENTOS TURBULENTOS E DISPERSÃO DE POLUENTES

Gousseau et al. (2011) apresentam um estudo comparativo entre a modelagem LES e a modelagem RANS para os fluxos convectivos e os fluxos de massa a duas configurações de prédios isolados e avalia a capacidade de predição do campo de concentração para cada modelo nas distintas configurações. Este estudo conclui que quando a fonte de emissão está localizada fora das regiões de recirculação tanto a modelagem LES, quanto a modelagem RANS podem fornecer resultados precisos.

Xing et al. (2013) utilizaram modelos baseados na viscosidade turbulenta inserindo equações para energia cinética turbulenta (k), taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (\mathcal{E}) e dissipação específica (ω) para simular numericamente um experimento em campo, projetado para representar a emissão de uma fonte atmosférica de CO_2 (dióxido de carbono), para fins de aquisição do campo de distribuição de concentrações. Os resultados encontrados para os modelos $k-\omega$, $k-\mathcal{E}$ e $k-\omega$ SST, quando comparados com os dados experimentais são satisfatórios.

Rocha et al. (2014) realizaram um trabalho de investigação computacional e utilizaram o modelo $k-\omega$ SST na avaliação do desempenho de turbinas eólicas. As informações de dados experimentais obtidos em um protótipo foram utilizadas para calibrar o modelo $k-\omega$ SST. Este estudo propiciou encontrar melhores resultados com o modelo para simulação do escoamento em turbinas.

Argyropoulos et al. (2015) apresentam uma revisão da literatura sobre modelagem computacional em escoamentos turbulentos. O estudo tem enfoque nos métodos

computacionais de predição dos fluxos turbulentos e suas aplicações. São apresentadas várias abordagens de modelagem da turbulência, além de várias aplicações, inclusive técnicas de modelagem RANS, URANS, LES, além de técnicas híbridas. São oferecidas informações que servem como base para seleção do modelo de turbulência mais adequado a cada caso de interesse. O modelo $k-\omega$ SST é apresentado como ideal para escoamento em camada limite, sob gradientes adversos de pressão. O estudo informa que o modelo foi validado para escoamento em palhetas de turbinas, escoamento em turbinas eólicas apresentando resultados satisfatórios, quando considerado o baixo custo computacional.

Tominaga et al. (2015) investigaram o escoamento ao redor de obstáculo isolado com diferentes inclinações do telhado para condição de atmosfera neutra. Foi realizado experimento em túnel de vento e realizada modelagem computacional para reproduzir o experimento. O modelo $k-\omega$ SST é utilizado. O estudo concluiu que os resultados encontrados concordaram bem com os dados experimentais de velocidade e energia cinética turbulenta, embora a precisão atrás do prédio fosse bastante pobre. Enquanto o desvio entre os resultados da simulação era em torno de 15% a montante do obstáculo, o desvio à jusante do prédio, chegou a 30%. Isto se deve basicamente ao fato de as flutuações das grandes escalas atrás do prédio não serem corretamente reproduzidas pelos modelos RANS, especialmente nesta região de alta vorticidade.

4.3 ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA

Em experimento de campo, Mavroidis et al. (1999) investigaram o comportamento da dispersão de contaminantes na zona de esteira de um prédio de construção cúbica, em investigação em campo, sob condições atmosféricas muito instáveis e muito estáveis. O modelo cúbico construído para o experimento simulou a dispersão de odores em duas orientações em relação à fonte. Gás marcador foi arrastado para a zona de esteira a uma curta distância do cubo. Depois disso a emissão da fonte foi interrompida e o decaimento da concentração foi observado. Os resultados encontrados mostraram que o tempo de decaimento, que era o tempo que levava para o gás se desvincular da zona de esteira, foi maior em condições de atmosfera estável e devido às baixas velocidades do vento. O experimento de campo foi realizado com campo de velocidade na direção perpendicular à face do cubo na primeira hipótese. E com o campo de velocidade do vento posicionado a 45° em relação à face do cubo, os resultados apresentaram

boa concordância em relação à formulação empírica, derivada a partir de ensaios de túnel de vento.

Em trabalho recente, Mavroidis et al. (2012) desenvolveram uma simulação computacional do experimento de Mavroidis et al. (1999). Para tanto, utilizaram o código de dinâmica dos fluidos computacional Adrea-HF. Adrea-HF é o código baseado no método dos volumes finitos de solução das médias de Reynolds aplicada às equações de Navier-Stokes (RANS) e foi desenvolvido para simular a flutuação da dispersão de poluentes em geometrias mais complexas. Adrea-HF resolve as equações para concentração de massa, quantidade de movimento (*momentum*), energia, fração mássica do poluente e flutuação da fração mássica do poluente. Mavroidis et al. (2012) simularam os tempos característicos de decaimento de concentração sob diferentes condições de estabilidade, comparando os resultados com os experimentos de campo de Mavroidis et al. (1999).

Padrões de tempo de decaimento característicos calculados pelo modelo apresentaram boa concordância com os experimentais. Observou-se também neste estudo a tendência para superestimar as taxas de diluição para a direção do vento normal à face do edifício. Neste estudo, as simulações mostraram que a concentração decai exponencialmente, de acordo com as observações experimentais. O trabalho mostrou que o tempo de residência experimental e calculado é menor no caso de condições atmosféricas instáveis, já que o gás marcador é diluído devido aos maiores níveis de transporte de energia cinética e aumento da dispersão em relação às condições estáveis.

Santos et al. (2009), em simulação computacional, investigaram a dispersão atmosférica de poluentes ao redor de um prédio sob diferentes condições de estabilidade próximo ao obstáculo. Neste trabalho foram propostas modificações no modelo matemático baseado na solução de equações de conservação de massa, momento linear e energia com uso do modelo de turbulência k- ϵ não padrão. As modificações propostas no modelo k- ϵ são a inclusão de correções na produção de energia cinética turbulenta e o uso da modificação da função de parede. Neste estudo, foram utilizados dados experimentais de túnel de vento e testes de campo para comparar os resultados obtidos nas simulações e se obteve razoável nível de confiança.

Yassin (2013) estudou o efeito da estabilidade térmica atmosférica sobre a dispersão de emissões de uma chaminé instalada na cobertura de um edifício em ambiente urbano. É utilizado um túnel de vento que simulou a dispersão do gás Etileno (C_2H_4) como marcador emitido através da chaminé do telhado de um edifício em diferentes condições. Neste

experimento foram realizadas medições de temperatura e velocidade. Os resultados indicaram que, para o caso de atmosférica instável, houve redução do fluxo de separação e aumento da intensidade de turbulência longitudinal na região próxima da esteira. Na condição de atmosfera instável, observou-se maior velocidade vertical e aumento de intensidade de turbulência vertical na região próxima da esteira. Verificou-se no experimento que, em condições estáveis, houve aumento da concentração na região próxima da esteira e que, em condições instáveis, ocorreu redução da concentração do poluente nesta região.

Diferentes fontes literárias mostram a viabilidade da aplicação das técnicas de modelagem matemática com a finalidade da predição de escoamento e da dispersão de poluentes ao redor de obstáculos em diferentes condições de estabilidade. Os trabalhos citados realizaram ambas as técnicas numéricas e experimentais para a investigação da dispersão de gases. Alguns modelos de turbulência possuem variações que podem permitir melhores resultados para determinadas condições específicas de escoamento. Observou-se que o estudo da dispersão de gases na esteira turbulenta, próximo ao obstáculo e em relação ao tempo de residência utilizando modelagem $k-\omega$ SST, se validada, pode ser de grande utilidade, considerando que não é exigido grande tempo computacional para a modelagem, além de ser menos oneroso modelar numericamente, em vez de realizar experimentos em campo ou túnel de vento.

4.4 CONCLUSÃO DA REVISÃO DA LITERATURA

O presente trabalho tem enfoque na simulação numérica do escoamento turbulento ao redor de obstáculos e sua influência na dispersão de contaminantes em diferentes condições de estabilidade. Desta forma foi verificado que a escolha e correta implementação (condições de contorno e condições iniciais) do modelo de turbulência é essencial para a boa acurácia dos resultados numéricos.

Tendo em vista que a DNS é impraticável com o poder computacional disponibilizado e a LES que tem boa acurácia para os casos que serão simulados, é, porém, custosa em termos computacionais. Optou-se pela implementação da modelagem RANS com modelos de viscosidade turbulenta de fechamento de primeira ordem com muitas aplicações semelhantes na literatura. Nas referências mais recentes encontradas, o modelo que surge com capacidade de solução do escoamento e dispersão ao redor de edificações é o $k-\omega$ SST proposto por Menter (1994). Esse modelo tem sido indicado como o que representa melhor as zonas com gradientes

adversos de pressão, zonas de separação, regiões próximas à parede e zonas do escoamento livre.

Se comparado ao modelo $k-\epsilon$, as equações de $k-\omega$ que representam a dissipação específica tendem a melhor prever a estimativa da energia cinética turbulenta em regiões de escoamento incidente. A teoria ainda indica a alta sensibilidade do modelo $k-\omega$ padrão à região do escoamento distante da parede. As constantes do modelo são mais bem ajustadas para a região próxima à parede, que não necessita da implementação de funções de tratamento específicas, sendo outra vantagem de escolha desse modelo. O $k-\omega$ SST surge com equações específicas para tratar de forma adequada as duas regiões, como pode ser verificado na seção de apresentação do modelo.

A modelagem do experimento de Murakami et al. (1990) é realizada para condição atmosférica neutra. Este estudo pretende verificar o desempenho do modelo escolhido na sua condição padrão e ajustá-lo da melhor maneira para representar o escoamento com as mesmas condições utilizadas no experimento. A modelagem do experimento Mavroidis et al. (1999) pretende avaliar a influência da estabilidade atmosférica na dispersão.

5 METODOLOGIA

O presente capítulo tem como objetivo apresentar a metodologia utilizada para atingir os objetivos específicos descritos no capítulo 2. Para tanto, este capítulo é dividido em duas principais seções: (i) descrição do método numérico para solução das equações de transporte e (ii) descrição das configurações estudadas.

5.1 SOLUÇÃO NUMÉRICA DAS EQUAÇÕES DE TRANSPORTE

Com o objetivo de prever o escoamento ao redor de um obstáculo cúbico e a dispersão de compostos liberados a partir de uma fonte foram feitas simulações numéricas computacionais, utilizando o código comercial de Dinâmica dos Fluidos Computacional *Ansys Fluent* versão 15.0. O código *Fluent* é baseado no método dos volumes finitos apresentado na seção 3.4.

As equações de conservação de massa (Equação 11), de quantidade de movimento (Equação 12), de energia (Equação 15) e de massa da espécie química (Equação 18) foram resolvidas numericamente utilizando o código *Fluent*. O modelo de turbulência selecionado para a investigação é o modelo $k-\omega$ SST, conforme indicado na seção 4.2. As equações do modelo de turbulência são descritas pelas equações 35 a 40.

O critério de convergência absoluta utilizado para condição estacionária é 10^{-6} . Isto significa que o resíduo de cada equação de conservação de uma iteração é comparado com este critério definido pelo usuário. Quando o resíduo é menor que este valor especificado se considera que há convergência. Esquema de interpolação espacial das variáveis nas equações de *momentum*, temperatura, concentração, k e ω é *Upwind* de 2ª Ordem. Esquema de interpolação temporal da variável concentração na equação de transporte de espécie utilizado é *Implicit* de 1ª Ordem. A simulação em regime transiente é realizada com *time-step* 0,02 s.

As condições de contorno, a representação esquemática do domínio computacional e a malha utilizada são apresentadas nas seções 5.21 e 5.22 onde são fornecidos detalhes dos experimentos simulados nesta dissertação.

5.2 DESCRIÇÃO DAS SIMULAÇÕES NUMÉRICAS ESTUDADAS

Na presente seção são discutidas as configurações experimentais cujos resultados são utilizados na avaliação do desempenho do modelo de turbulência $k-\omega$ SST: (i) túnel de vento de Murakami et al. (1990) e (ii) experimento em campo de Mavroidis et al. (1999). Adicionalmente, associadas a cada experimento, são descritas as simulações numéricas, sendo apresentados domínio computacional, malha e condições de contorno.

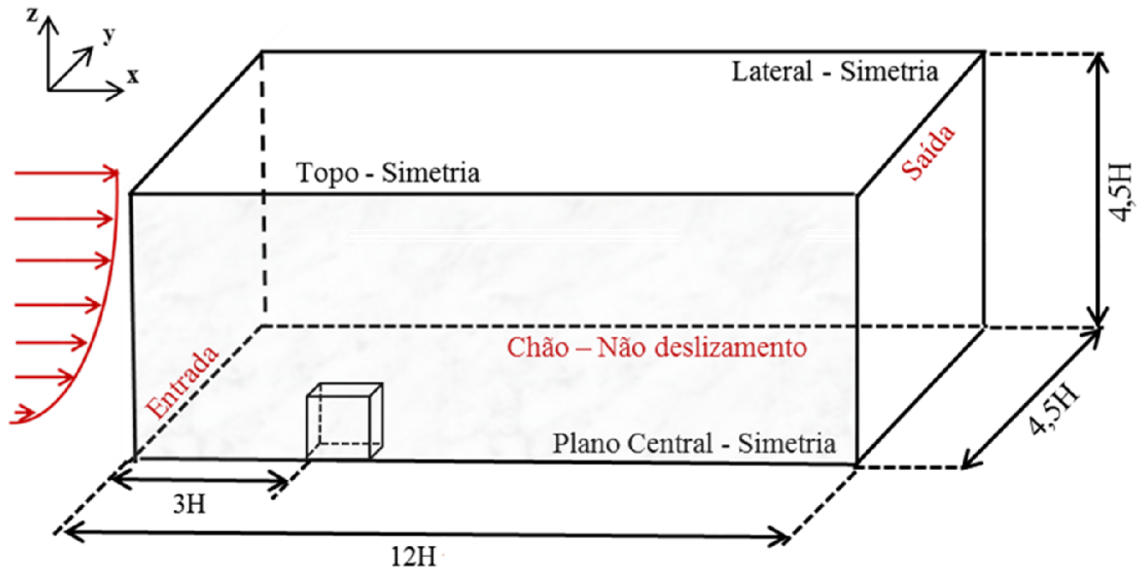
5.2.1 Configuração do experimento em túnel de vento de Murakami et al., (1990) e simulação numérica correspondente

Murakami et al. (1990) realizaram experimento em túnel de vento utilizando obstáculo em forma de cubo de aresta 200 mm com número de Reynolds 70000, com a finalidade de investigar a velocidade média, as tensões normais turbulentas e a energia cinética turbulenta.

Esta seção apresenta as condições de escoamento do experimento em túnel de vento por Murakami et al. (1990) realizado em atmosfera neutra. A Figura 7 apresenta a representação do domínio computacional do experimento de Murakami et al. (1990). No presente estudo foram utilizadas as condições de contorno, conforme ilustrado na Figura : (i) entrada (*inlet*), imposição de perfis verticais de velocidade, energia cinética turbulenta e dissipação específica de energia cinética turbulenta; (ii) parede superior, simetria; (iii) paredes laterais, simetria; (iv) parede inferior, condição de não deslizamento e (v) saída, condição de escoamento totalmente desenvolvido.

A condição de contorno simetria é caracterizada pela determinação de que as derivadas das variáveis de interesse sejam nulas nessas paredes. Quanto à condição de não deslizamento, as velocidades são definidas como iguais a zero nessas superfícies. Na condição de escoamento totalmente desenvolvido, as derivadas de todas as variáveis na direção principal são consideradas nulas. Para a concentração, foi definida a condição de contorno igual ao ar seco, na entrada do domínio e definida vazão de gás marcador na superfície da chaminé.

Figura 7 – Representação esquemática do domínio computacional e condições de contorno.



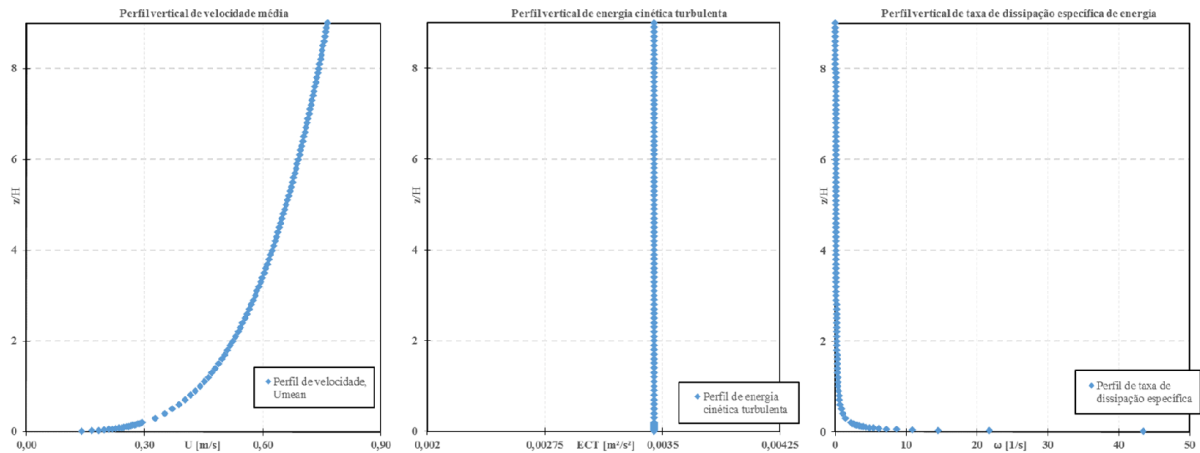
A tabela a seguir apresenta as condições específicas aplicadas na entrada do domínio computacional.

Para a construção dos perfis de entrada de velocidade, energia cinética turbulenta e taxa de dissipação específica foram utilizados os mesmos critérios definidos em Santos (2000). O perfil de velocidade é dado por uma aproximação logarítmica cuja equação é apresentada na Tabela 2. A energia cinética turbulenta na entrada do domínio computacional é calculada como um perfil constante baseado no quadrado da velocidade na altura do prédio. A taxa de dissipação específica na entrada do domínio computacional é calculada em relação à energia cinética turbulenta, a altura, a constante empírica, C_μ e a constante de Von Kàrman, κ . A Figura 8 mostra os perfis de velocidade média, energia cinética turbulenta e taxa de dissipação específica de energia na entrada do domínio computacional, utilizado para representar o experimento realizado por Murakami et al. (1990).

Tabela 2 – Condições de contorno na entrada do domínio utilizada para representar o experimento realizado por Murakami et al. (1990)

Localização	Condição de contorno	
Entrada	$\overline{U}_1 \propto z^{0,25}, \overline{U}_2=\overline{U}_3=0$	Perfis verticais de velocidade utilizados para representar a velocidade na entrada do experimento Murakami et al. (1990)
	$k=0,025 W_H^2$	Perfil vertical de energia cinética turbulenta utilizado na entrada do domínio computacional baseado na energia cinética na altura do prédio.
	$\omega = \frac{\frac{1}{k^2}}{C_\mu^{\frac{1}{4}} \kappa z}$	Perfil vertical de taxa de dissipação específica na entrada do domínio em relação à energia cinética turbulenta.
Saída	$\frac{\partial \overline{U}_1}{\partial x_1} = \frac{\partial \overline{U}_2}{\partial x_1} = \frac{\partial k}{\partial x_1} = \frac{\partial \omega}{\partial x_1} = 0$	
Lateral	$\overline{U}_2 = \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial x_2} = \frac{\partial \overline{U}_3}{\partial x_2} = \frac{\partial k}{\partial x_2} = \frac{\partial \omega}{\partial x_2} = 0$	
Plano central	$\overline{U}_2 = \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial x_2} = \frac{\partial \overline{U}_3}{\partial x_2} = \frac{\partial k}{\partial x_2} = \frac{\partial \omega}{\partial x_2} = 0$	
Chão	$\overline{U}_1 = \overline{U}_2 = \overline{U}_3 = \frac{\partial k}{\partial x_3} = \frac{\partial \omega}{\partial x_3} = 0$	
Topo	$\overline{U}_3 = \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial x_3} = \frac{\partial \overline{U}_2}{\partial x_3} = \frac{\partial k}{\partial x_3} = \frac{\partial \omega}{\partial x_3} = 0$	
Paredes do prédio	$\overline{U}_1 = \overline{U}_2 = \overline{U}_3 = 0$ $\frac{\partial k}{\partial n} = \frac{\partial \omega}{\partial n} = 0$, onde n é a direção normal à parede.	

Figura 8 – Perfil vertical de velocidade média, ECT e taxa de dissipação específica na entrada do domínio.



No presente estudo foi usada a malha computacional representada na Figura 9 (a), a fim de estudar o escoamento ao redor de obstáculos com a utilização do modelo $k-\omega$ SST. Para reduzir o tempo de processamento, somente metade do domínio foi resolvido, uma vez que o problema apresenta natureza simétrica. Como o modelo $k-\omega$ SST não contempla função de parede, no presente estudo, a malha computacional foi criteriosamente testada, de modo a manter a precisão dos resultados independentemente da malha computacional utilizada. Nesta região, a malha computacional foi refinada, conforme ilustrado na Figura 9 (b)-(c), de tal maneira que $y^+ < 5$.

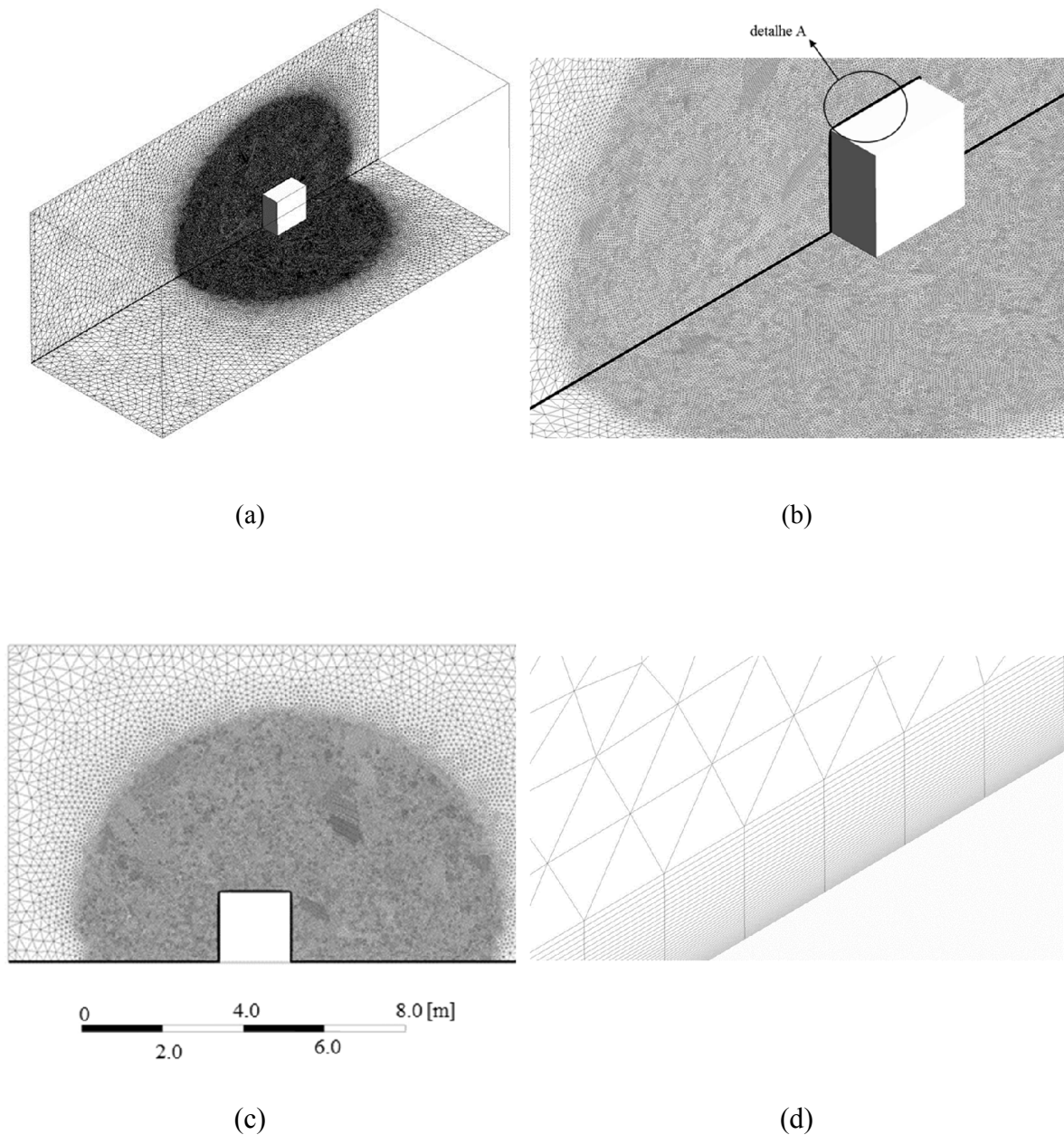
Na Figura 9 (d) é apresentado o detalhe A. Pode-se notar que os elementos mais próximos ao prédio são prismas. Os prismas são gerados com a função *Inflation* que permite separar em camadas e refinar os prismas mais próximos às paredes do domínio computacional.

A função *Sphere of Influence* é utilizada com a finalidade de controlar a relação de crescimento entre os elementos mais próximos do obstáculo e àqueles localizados a maiores distâncias. Buscou-se controlar esta relação no eixo x à montante do prédio em 2 alturas de prédio, à jusante em 3 alturas de prédio. Em relação ao eixo z , a esfera de influência foi utilizada até 2 alturas de prédio. Em relação ao eixo y , a esfera de influência foi utilizada até 2 alturas de prédio.

Foi utilizado o *software Meshing*, do pacote *Ansys 15.0*, para gerar a malha. O Apêndice A apresenta o teste da malha computacional que verificou a independência dos resultados às modificações para as malhas computacionais grossa, média e fina. Os resultados são apresentados com a malha grossa (aproximadamente 3,0 milhões de elementos) porque exige menor esforço computacional.

Pode-se observar na Figura 9 que é uma malha não estruturada, com elementos de volume tetraédricos e prismáticos. Esta malha foi gerada considerando uma não uniformidade, sendo que os menores elementos de volume estão localizados mais próximos ao obstáculo. Próximo às paredes do prédio e ao solo foram gerados elementos prismáticos. Os elementos são gerados por linhas retas paralelas ao piso e paredes e interceptam a malha de tetraedros. Assim é definida a quantidade de linhas e o espaçamento entre elas. Esta estratégia de refinamento possibilita que os elementos mais próximos às fronteiras físicas, onde são observados os maiores gradientes, tenham as faces perpendiculares ou paralelas à direção principal do escoamento.

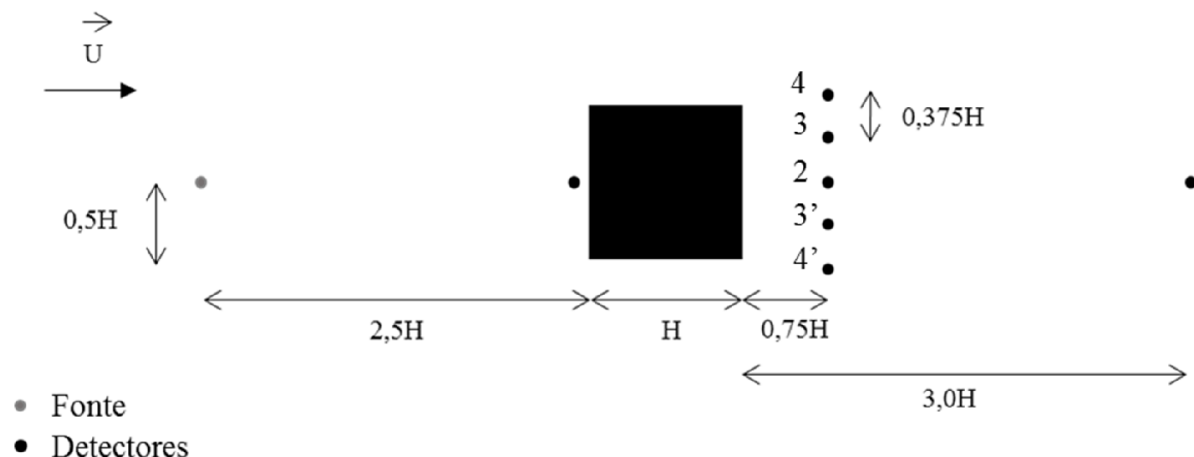
Figura 9 – Visualização da malha construída para este estudo: (a) vista geral, (b) vista ampliada do plano central e prédio, (c) vista ampliada no plano central do prédio e (d) representação do detalhe A.



5.2.2 Configuração do experimento de campo de Mavroidis et al., (1999) e simulação numérica correspondente

O experimento de Mavroidis et al. (1999) foi realizado em campo, utilizando um obstáculo cúbico de aresta 2 metros, cujas distâncias e condições de estratificação térmica são apresentadas nesta seção. A Figura 10 exibe uma vista superior (plano xy em $z/H=1,0$) de um dos experimentos de Mavroidis et al. (1999), apresentando a posição do obstáculo em relação à fonte e aos detectores utilizados para medições. A configuração utilizada para simulação será a apresentada na figura a seguir, embora o estudo utilize outra disposição no experimento.

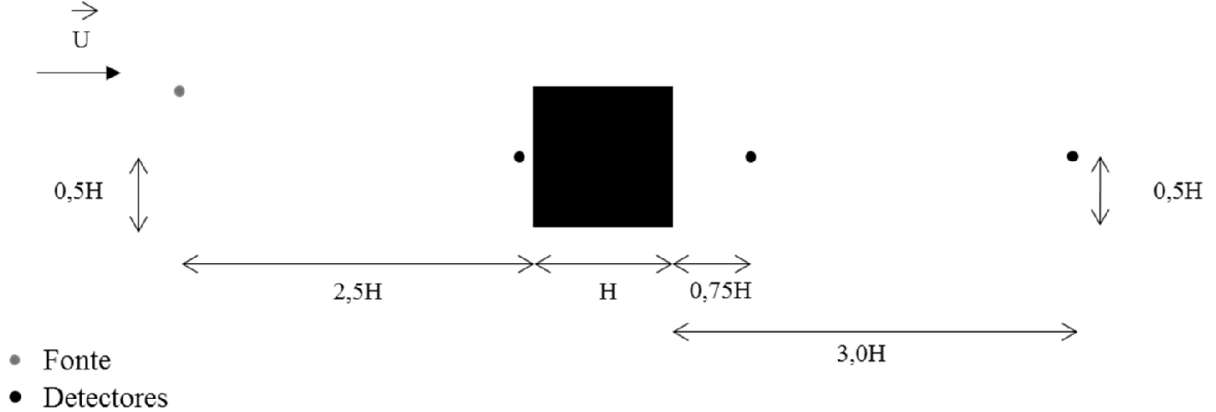
Figura 10 – Vista superior da disposição do cubo em relação à fonte e posição dos detectores.



Fonte: Mavroidis et al. (1999).

Gás traçador foi arrastado para a zona de esteira a uma curta distância do cubo. Depois disso a emissão da fonte foi interrompida e o decaimento da concentração foi observado. Os resultados encontrados mostram que o tempo de decaimento, que é o tempo que leva para o gás se desvincular da zona de esteira, foi maior em condições de atmosfera estável e devido às baixas velocidades do vento.

Figura 11 – Vista do plano xz (em $y=0,0$), localização do cubo em relação à fonte e posição dos detectores.



Fonte: Mavroidis et al. (1999).

Mavroidis et al. (2012) fornece perfis verticais de velocidade, energia cinética turbulenta e temperatura na entrada do domínio para o experimento Mavroidis et al. (1999). Os perfis utilizados para avaliação de desempenho no presente estudo são apresentados na Figura 12. Para resolução da equação de energia considerou-se o perfil uniforme de temperatura na entrada do domínio computacional.

A Figura 13 apresenta a representação do domínio computacional do experimento de Mavroidis et al. (1999). Admitem-se as seguintes condições de contorno: Entrada – Imposição de perfis verticais de velocidade k e ω ; Paredes laterais e superior – Simetria; Parede inferior – Não deslizamento; Saída – Condição de escoamento totalmente desenvolvido.

Na simulação em regime permanente, a condição de contorno para concentração na entrada – concentração nula; Paredes laterais e superior – simetria; Parede inferior – concentração nula; Saída do domínio – derivada da concentração nula.

Na simulação em regime transiente, a solução da equação em regime permanente foi utilizada como condição inicial.

Figura 12 – Perfil vertical da velocidade média, ECT e temperatura na entrada do domínio para os casos testes.

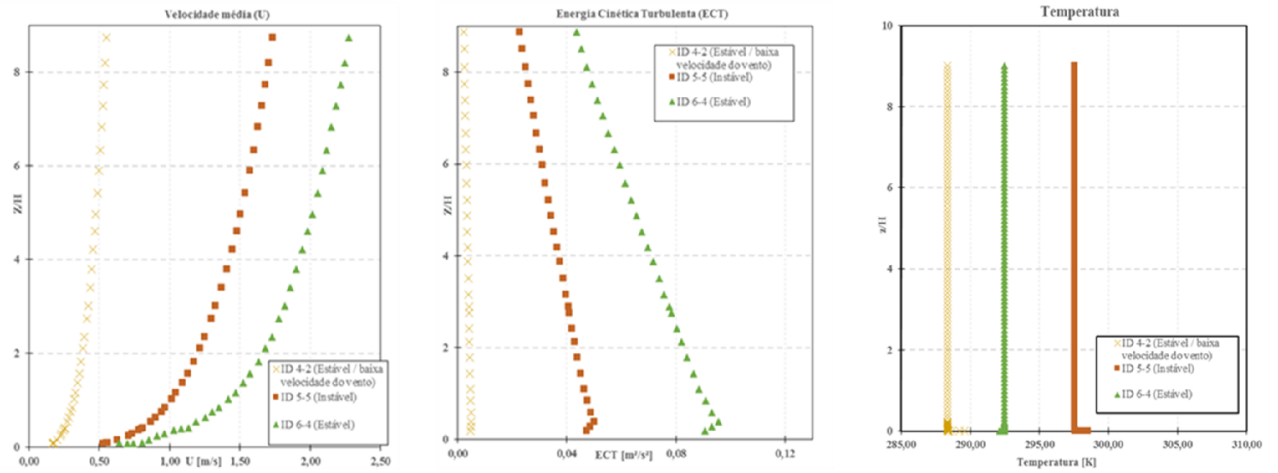


Tabela 3 – Detalhes da simulação numérica para os casos testes. Vazão da fonte, velocidade de escoamento na altura do prédio e parâmetros de estabilidade atmosférica.

Identificação	Vazão de C_3H_6	U_H [$m s^{-1}$]	Comprimento de Monin-Obukhov [m]	Fluxo de calor no solo [W/m^2]
Caso Teste	[$m^3 s^{-1}$]			
ID 5-5 (Instável)	$2,77 \cdot 10^{-5}$	1,20	-2,2	+65,3
ID 6-4 (Estável)	$7,07 \cdot 10^{-5}$	1,66	1,2	-36,0
ID 4-2 (Estável / vento fraco)	$7,07 \cdot 10^{-5}$	0,38	14,8	-21,9

Figura 13 – Representação esquemática do domínio computacional e condições de contorno

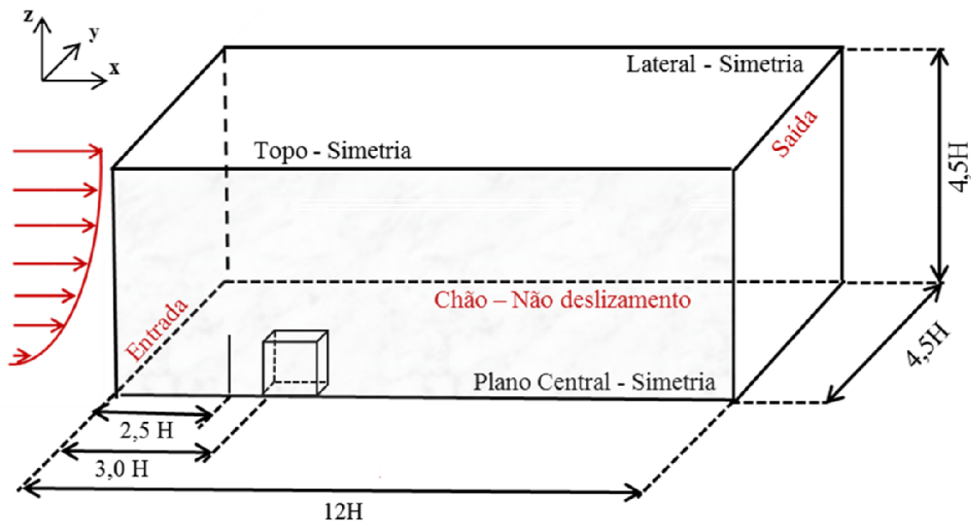


Tabela 4 – Condições de contorno na entrada do domínio utilizada para representar o experimento realizado por Mavroidis et al. (1999)

Localização	Condição de contorno	
Entrada	$\overline{U}_1, k \text{ e } \theta$ (ver Figura 12) $\overline{U}_2 = \overline{U}_3 = 0$ $\overline{c} = 0$	Perfis verticais utilizados na entrada para representar experimento Mavroidis et al. (1999).
	$\omega = \frac{k^{\frac{1}{2}}}{C_{\mu}^{\frac{1}{4}} \kappa z}$	Perfil vertical de taxa de dissipação específica na entrada do domínio em relação à energia cinética turbulenta.
Saída	$\frac{\partial \overline{U}_1}{\partial x_1} = \frac{\partial \overline{U}_2}{\partial x_1} = \frac{\partial \overline{U}_3}{\partial x_1} = 0$ $\frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_1} = \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_1} = \frac{\partial k}{\partial x_1} = \frac{\partial \omega}{\partial x_1} = 0$	
Lateral	$\overline{U}_2 = \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial x_2} = \frac{\partial \overline{U}_3}{\partial x_2} = 0$ $\frac{\partial k}{\partial x_2} = \frac{\partial \omega}{\partial x_2} = \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_2} = \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_2} = 0$	
Plano central	$\overline{U}_2 = \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial x_2} = \frac{\partial \overline{U}_3}{\partial x_2} = 0$ $\frac{\partial k}{\partial x_2} = \frac{\partial \omega}{\partial x_2} = \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_2} = \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_2} = 0$	
Chão	$\overline{U}_1 = \overline{U}_2 = \overline{U}_3 = 0$ $\frac{\partial k}{\partial x_3} = \frac{\partial \omega}{\partial x_3} = \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_3} = 0$ Fluxo de calor constante (ver Tabela 3).	
Topo	$\overline{U}_3 = \frac{\partial \overline{U}_1}{\partial x_3} = \frac{\partial \overline{U}_2}{\partial x_3} = 0$ $\frac{\partial k}{\partial x_3} = \frac{\partial \omega}{\partial x_3} = \frac{\partial \overline{\theta}}{\partial x_3} = \frac{\partial \overline{c}}{\partial x_3} = 0$	
Paredes do obstáculo	$\overline{U}_1 = \overline{U}_2 = \overline{U}_3 = 0$; $\frac{\partial \overline{\theta}}{\partial n} = \frac{\partial \overline{c}}{\partial n} = \frac{\partial k}{\partial n} = \frac{\partial \omega}{\partial n} = 0$, onde n é a direção normal à parede.	

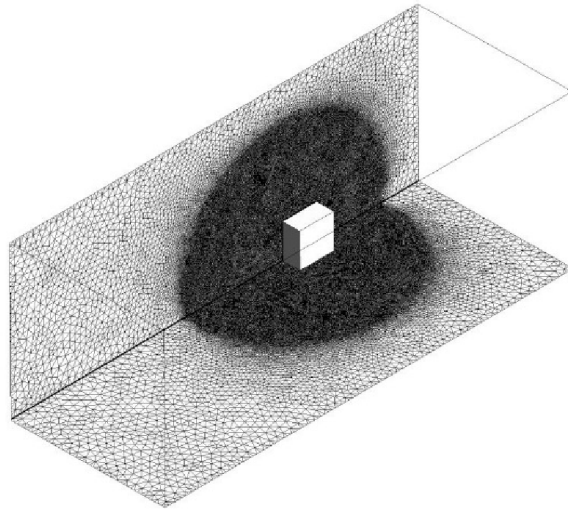
O critério de convergência escolhido para a resolução no presente estudo, de modo a obter eficiência e precisão, é igual 10^{-5} . O *time-step* adotado para a modelagem é igual a 0,02 s. O detector UVIC foi utilizado para medição da concentração do experimento Mavroidis et al. (1999) e o tempo de resposta é aproximadamente 0,02 s. Verificou-se que a condição Número de *Courant* menor que 1 é satisfeita para esse *time-step* adotado.

5.2.3 Teste de sensibilidade da malha computacional

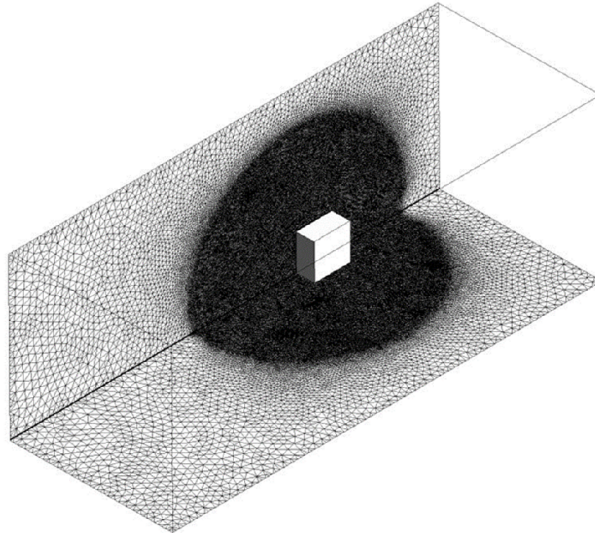
Para avaliar a sensibilidade da malha, foram selecionadas três malhas com diferentes resoluções para simular o escoamento, segundo as condições realizadas em campo por Mavroidis (1999): (i) a malha GROSSA foi construída com 2.912.496 elementos; a malha MÉDIA com 4.368.248 elementos e a malha FINA definida com 7.447.202 elementos. Para a construção das malhas computacionais foi utilizado o *software Ansys Meshing* 15.0. Como critério de construção foi modificado o tamanho do menor elemento na esfera de influência. Para a malha GROSSA $5,0 \cdot 10^{-2}$ m, para a malha MÉDIA $4,0 \cdot 10^{-2}$ m e para a malha FINA $3,0 \times 10^{-2}$ m.

Na análise do teste de sensibilidade da malha computacional (Figura 15) foram utilizados os perfis verticais das seguintes variáveis: (i) velocidade média longitudinal, (ii) energia cinética turbulenta (ECT) e (iii) concentração do contaminante. Foram obtidos perfis dentro da esteira turbulenta do obstáculo em quatro posições – " $x/H=0,25$ ", " $x/H=0,50$ ", " $x/H=1,00$ " e " $x/H=1,50$ " –, com a finalidade de observar o comportamento de cada malha em estudo. Os gráficos a seguir têm o objetivo de apresentar as comparações de malha realizadas. A malha escolhida para o desenvolvimento do estudo e validação do modelo será a Malha GROSSA, porque não houve modificação significativa dos resultados para os perfis obtidos, quando a malha em estudo foi mais refinada.

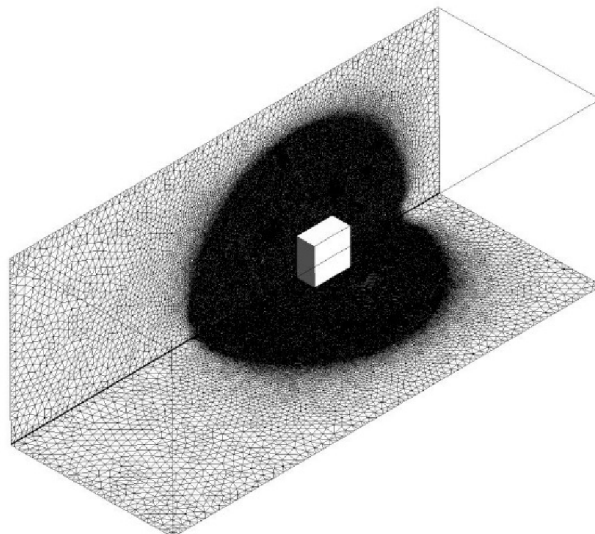
Figura 14 – Malhas computacionais testadas: (a) GROSSA, (b) MÉDIA e (c) FINA.



(a)

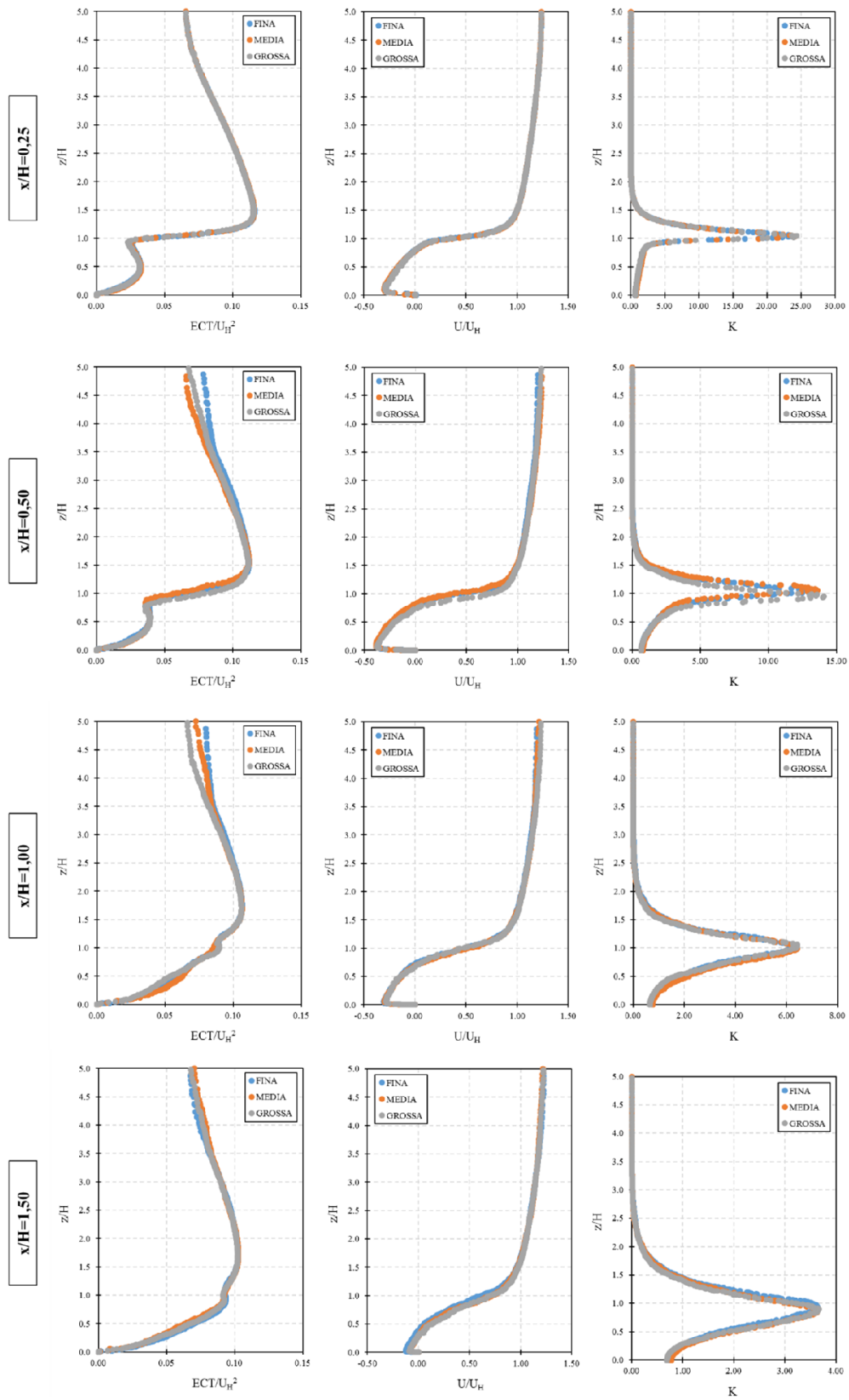


(b)



(c)

Figura 15 – Perfil vertical de ECT, U e K em diferentes perfis na esteira turbulenta.



6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

O modelo de turbulência $k-\omega$ SST foi utilizado para simular numericamente duas situações experimentais: (i) Murakami et al. (1990), realizado em túnel de vento com número de Reynolds, cerca de 7×10^4 , e (ii) o experimento realizado em campo por Mavroidis et al. (1999), com número de Reynolds aproximadamente igual a 6×10^4 .

Os resultados de escoamento e dispersão de contaminantes são apresentados em sua forma adimensional. É importante destacar que estudos mostram a independência desses resultados em relação ao número de Reynolds para valores acima de $2 \cdot 10^4$ (LIM et al., 2007). Isto significa que pequenas variações na velocidade do vento e na altura do obstáculo não mudam significativamente o campo de velocidade e a distribuição de concentração, quando o escoamento está na faixa de independência.

O experimento em túnel de vento realizado por Murakami et al. (1990), em condição de atmosfera neutra, é utilizado para testar a sensibilidade dos resultados de simulação numérica à modificação de constantes empíricas do modelo $k-\omega$ SST.

O conjunto de constantes empíricas com melhor ajuste, comparativamente aos resultados de Murakami et al. (1990), é utilizado para simular numericamente o que foi estudado em campo por Mavroidis et al. (1999). Nestes experimentos foram discutidos e apresentados escoamento e concentração de propileno emitido à montante do prédio, para condições levemente estáveis, muito estáveis e muito instáveis.

6.1 TESTE DE SENSIBILIDADE DO MODELO DE TURBULÊNCIA $k-\omega$ SST ÀS MODIFICAÇÕES DAS CONSTANTES EMPÍRICAS a_1 E C_{lim}

Esta seção busca mostrar os testes de sensibilidade para a variação das constantes empíricas do modelo $k-\omega$ SST, sob número de Reynolds de aproximadamente $7 \cdot 10^4$, nos resultados médios de velocidade longitudinal e energia cinética turbulenta. Experimento realizado por Murakami et al. (1990), esta escolha se deu em razão de ser um experimento já representado por diferentes modelos de turbulência em estudos anteriores. Deste modo, o desempenho do modelo de turbulência ajustado, utilizado no presente estudo, pode ser avaliado.

A constante empírica a_1 está presente na formulação da viscosidade turbulenta do modelo é apresentada na seção 3.2.3.3, conforme equação do modelo:

$$v_T = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)} \quad (46)$$

A modificação de a_1 na equação da viscosidade turbulenta objetivou minimizar o comprimento da zona de recirculação atrás do prédio. Este efeito no escoamento pode melhorar significativamente os resultados médios do campo de velocidade para representação do experimento.

Quanto maior valor a constante empírica a_1 assume, menor será o comprimento da zona de recirculação atrás do prédio. Entretanto, nas zonas de estagnação ocorre modificação na energia cinética turbulenta produzida pelo modelo. Para resolver este efeito, são propostas algumas modificações na constante empírica C_{lim} que compõe a função “*Production Limiter*”.

A função “*Production Limiter*” é apresentada na seção 5.1 que mostra a formulação:

$$P_k = \min(P_k, C_{lim} \cdot \rho \cdot \varepsilon) \quad (47)$$

Buscou-se com ajuste da constante empírica, C_{lim} , melhorar o desempenho do modelo em representar a produção de energia cinética nas zonas de estagnação, visto que os testes realizados para esta constante empírica até o presente estudo se deram na condição padrão do modelo.

Portanto, foram realizadas modificações simultâneas nas constantes a_1 e C_{lim} com o propósito de verificar a sensibilidade do modelo a estas constantes, escolher o melhor ajuste para representar o escoamento Murakami et al. (1990) e, posteriormente, aplicar esta escolha para representar o escoamento e dispersão do experimento realizado por Mavroidis (1999). Vale ressaltar que não foram encontrados na revisão da literatura, outros testes com estas constantes empíricas. Na Tabela 5 são apresentados os parâmetros para os oito testes de sensibilidade realizados.

Tabela 5 – Parâmetros alterados nos testes de sensibilidade do modelo k- ω SST.

Parâmetros	$a_1=0,31$	$a_1=1,00$	$a_1=1,50$	$a_1=2,00$	$a_1=2,50$	$a_1=3,50$
$c_{lim}=3$						TS-8
$c_{lim}=5$				TS-5	TS-6	TS-7
$c_{lim}=10$	TS-1	TS-2	TS-3	TS-4		

A Tabela 6 apresenta o comprimento adimensional da zona de recirculação (ZR) atrás do prédio, medida no plano xz em $y=0,0$. Pode-se observar que o comprimento da ZR é significativamente alterado com a modificação das constantes empíricas do modelo.

As figuras 16 (a) – (h) apresentam contornos de velocidade na direção longitudinal no plano xz em $(y=0,0)$, adimensionalizado pela velocidade na direção x na altura do prédio, para diferentes constantes empíricas que foram testadas. A legenda de cores apresentada mostra os menores valores de velocidade longitudinal na cor azul.

Pode-se observar que no TS-1, condição padrão do modelo, a região de menores velocidades é maior que as demais situações que foram testadas, ou seja, o comprimento da zona de recirculação (ZR) diminui quando aumentamos o valor de a_1 , ao observar a Equação 46, da viscosidade turbulenta para o modelo utilizado no presente estudo.

Aumentar a constante empírica a_1 significa aumentar a viscosidade turbulenta do fluido em escoamento, fazendo com que o escoamento fique mais viscoso e com isto apresente menor recirculação atrás do prédio. No TS-1, pode-se perceber também que a recirculação no topo do prédio é maior e indica que não há recolamento no teto do prédio. O comprimento da ZR adimensionalizado em estudo de túnel de vento realizado por Murakami et al. (1990) é igual a 1,2.

As figuras 17 (a)-(h) apresentam contornos Energia cinética turbulenta (ECT) no plano xz em $(y=0,0)$, adimensionalizado pelo quadrado da velocidade na direção x na altura do prédio, para diferentes constantes empíricas que foram testadas. A legenda de cores apresentada mostra os menores valores de ECT na cor azul. Pode-se observar que no TS-1, condição padrão do modelo, a região de maior ECT ocorre no teto do prédio, muito semelhante aos resultados do experimento em túnel de vento, realizado por Murakami et al. (1990).

O TS-4 proposto melhorou o comprimento da ZR como pode ser observado na Figura 16(b) e consequente piora na representação da ECT nas zonas de estagnação na Figura 17. O TS-4 representou o menor comprimento adimensionalizado da ZR, como pode ser observado na Tabela 5. Como a modelagem RANS superestima este comprimento e, em razão da predição deficitária do campo de escoamento, apresenta pobre predição da dispersão do poluente, optou-se pelo menor comprimento da ZR, para avaliar a dispersão do poluente no presente estudo, já que em todos os testes realizados não foi possível encontrar ao mesmo tempo menor comprimento da ZR e ECT equivalente ao experimento em túnel de vento.

Tabela 6 – Comprimento da zona de recirculação atrás do prédio para cada teste de sensibilidade realizado

Descrição	X_R
TS-1 ($a_1 = 0,31$ e $c_{lim} = 10$)	2,70H
TS-2 ($a_1 = 1,00$ e $c_{lim} = 10$)	2,12H
TS-3 ($a_1 = 1,50$ e $c_{lim} = 10$)	2,00H
TS-4 ($a_1 = 2,00$ e $c_{lim} = 10$)	1,63H
TS-5 ($a_1 = 2,00$ e $c_{lim} = 5$)	2,25H
TS-6 ($a_1 = 2,50$ e $c_{lim} = 5$)	2,20H
TS-7 ($a_1 = 3,50$ e $c_{lim} = 5$)	2,38H
TS-8 ($a_1 = 3,50$ e $c_{lim} = 3$)	2,50H

O TS-2 e o TS-3 apresentam aumento no comprimento da ZR em relação ao TS-4. Além disso os contornos de ECT nas zonas de estagnação não apresentaram melhores resultados, como pode ser observado na Figura 17 a modificação da função C_{lim} para um valor menor. De acordo com a Equação 47, diminui a produção de energia cinética por cisalhamento nas zonas de estagnação e isto pode ser verificado nos contornos de ECT nestas zonas.

Entretanto em relação ao TS-4 houve aumento no comprimento da ZR. Por todas as informações apresentadas até aqui, o TS-4 foi escolhido para avaliar a dispersão do composto Propileno no experimento de campo realizado por Mavroidis et al. (1999).

Tendo sido analisados diversos casos no teste de sensibilidade, os parágrafos seguintes apresentam a comparação entre a simulação numérica realizada neste estudo e as simulações

numéricas e trabalhos experimentais realizados em estudos anteriores, com a finalidade de analisar criticamente o desempenho do modelo $k-\omega$ SST: experimento de túnel de vento realizado por Murakami et al. (1990), simulações numéricas realizadas por Murakami et al. (1990) e Santos (2000), e Cezana (2007).

Figura 16 – Contorno de velocidade na direção longitudinal. Vista do plano central do prédio para as seguintes constantes empíricas: (a) TS-1, (b) TS-2, (c) TS-3, (d) TS-4, (e) TS-5, (f) TS-6, (g) TS-7 e (h) TS-8, com uso do modelo $k-\omega$ SST.

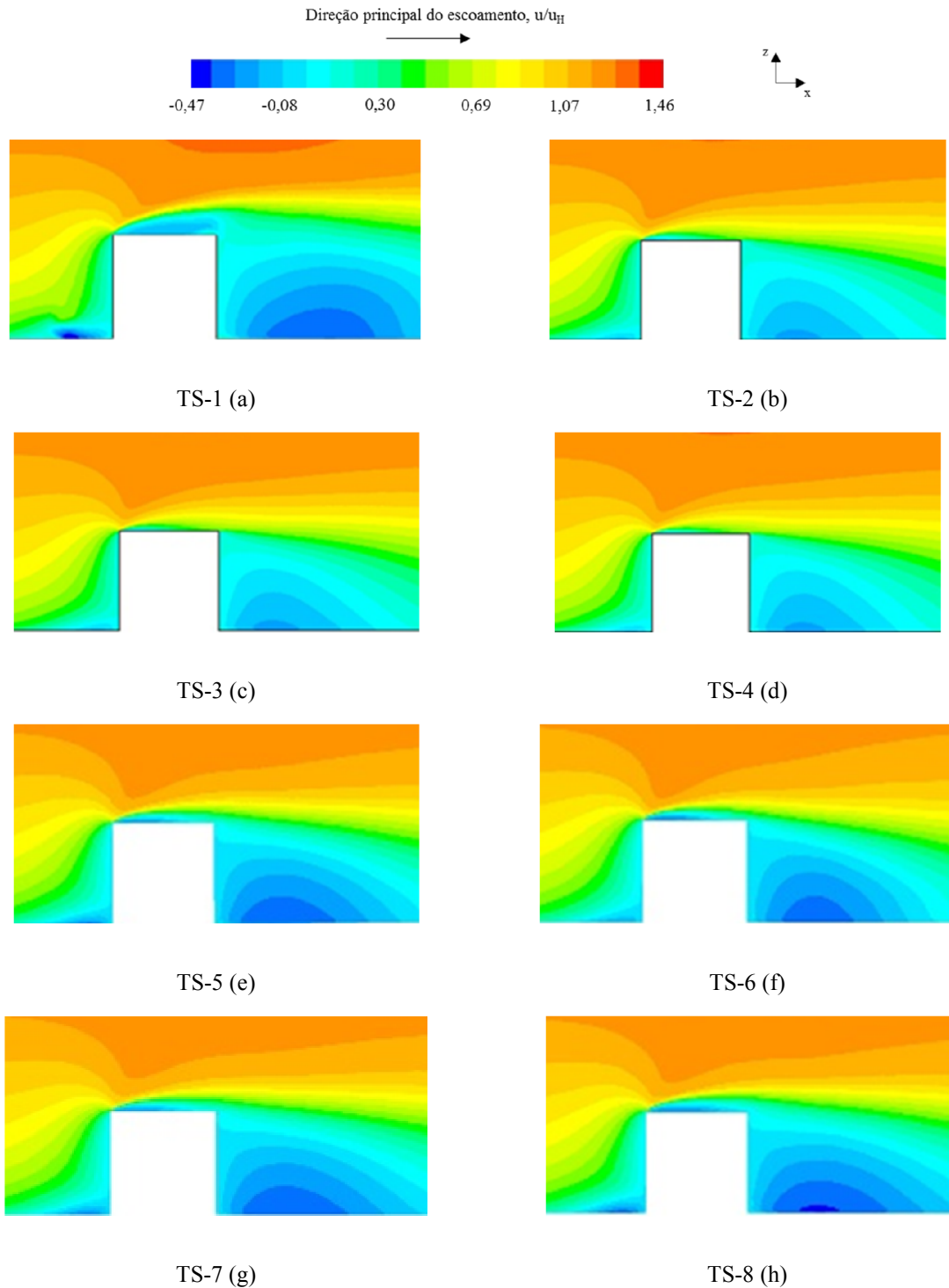
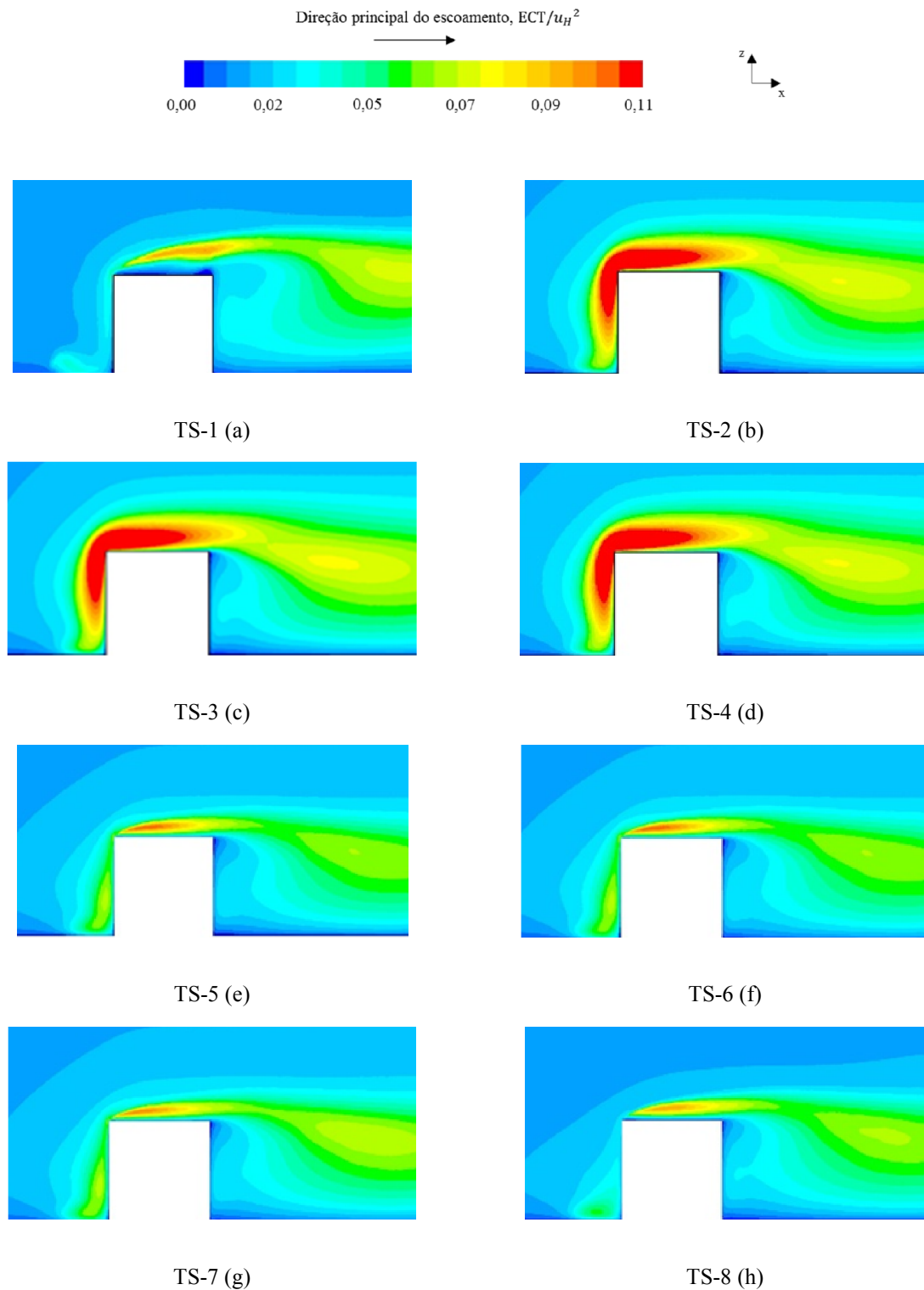


Figura 17 – Contorno de Energia cinética turbulenta. Vista do plano central do prédio para as seguintes constantes empíricas: (a) TS-1, (b) TS-2, (c) TS-3, (d) TS-4, (e) TS-5, (f) TS-6, (g) TS-7 e (h) TS-8, com uso do modelo $k-\omega$ SST.



Os TS-5, TS-6, TS-7 e o TS-8 apresentaram contornos de ECT compatível com os resultados do experimento realizado por Murakami et al. (1990).

Tabela 7 – Comprimento da região de recirculação atrás do prédio (normalizado por H)

Descrição	X_R
Experimento (Murakami et al. 1990)	1,2
LES (Murakami et al. 1990)	1,4
k- ϵ Padrão (Murakami et al. 1990)	-
k- ϵ Modificado (Santos 2000)	2,17
ω -BSL (Cezana, 2007)	2,1
ω (Cezana, 2007)	2,1
k- ω SST (TS-4)	1,63
k- ω SST (TS-6)	2,2

Murakami et al. (1990) realizaram um estudo comparativo dos dados de túnel de vento, utilizando simulações numéricas com diferentes modelos de turbulência: os resultados dos modelos k- ϵ Padrão e LES. Santos (2000) buscou representar o experimento com uso do modelo k- ϵ Modificado. Cezana (2007) realizou simulação numérica do experimento com modelo ω e do modelo ω -BSL. A avaliação dos modelos é realizada através de comparação do campo de vetores velocidade, energia cinética turbulenta e as componentes das tensões normais.

A Tabela 7 mostra o cálculo do comprimento da zona de recirculação atrás do prédio para o experimento e os diferentes modelos utilizados para representar Murakami et al. (1990). Este comprimento é adimensionalizado com a altura do obstáculo. Pode-se observar que o resultado encontrado para TS-4 é mais próximo do resultado experimental: o comprimento da ZR é maior apenas que a modelagem LES. Considerando o maior custo computacional da modelagem LES em relação aos modelos RANS utilizados no presente estudo, apresenta-se como positivo este dado. O comprimento da ZR para TS-6 apresenta um acréscimo em relação à TS-4, no entanto é compatível com os resultados dos demais modelos testados.

A Figura 18 revela o campo de velocidade média no plano central do prédio cúbico obtido no experimento de túnel de vento, LES e k- ϵ Padrão realizados por Murakami et al. (1990), do k- ϵ Modificado por Santos (2000). Mostra ainda o resultado obtido no estudo realizado por Cezana (2007) e do modelo ω e ω -BSL. Pode-se observar que TS-4 apresenta menor

recirculação atrás do prédio que TS-6. Nota-se ainda que os vetores recolam no teto do prédio, a exemplo dos resultados experimentais.

A Figura 19 exibe a distribuição de energia cinética turbulenta no plano x-z em y=0,0. Pode-se observar que há algumas discrepâncias do modelo de turbulência do presente estudo, quando comparados com os dados experimentais. O TS-4, embora tenha apresentado resultado relativamente bom para o comprimento da ZR, não é discrepante na distribuição da ECT com desempenho semelhante ao modelo k-ε Padrão. Nota-se que TS-6 e a LES reproduzem com boa precisão a distribuição de ECT, sendo consideravelmente melhores que os demais modelos utilizados.

As Figura 20, 21 e 22 expressam a distribuição no plano central do prédio de $\overline{u_1' u_1'}$, $\overline{u_2' u_2'}$ e $\overline{u_3' u_3'}$, respectivamente. Uma vez que as componentes normais do tensor de Reynolds não são fornecidas diretamente pelo modelo k-ω SST, as componentes normais do tensor das tensões são calculadas como:

$$\overline{u_1' u_1'} = \frac{2\mu_{\text{turb}}}{\rho_0} \frac{\partial \overline{U_1}}{\partial x_1} - \frac{2}{3}k \quad (48)$$

$$\overline{u_2' u_2'} = \frac{2\mu_{\text{turb}}}{\rho_0} \frac{\partial \overline{U_2}}{\partial x_2} - \frac{2}{3}k \quad (49)$$

$$\overline{u_3' u_3'} = \frac{2\mu_{\text{turb}}}{\rho_0} \frac{\partial \overline{U_3}}{\partial x_3} - \frac{2}{3}k \quad (50)$$

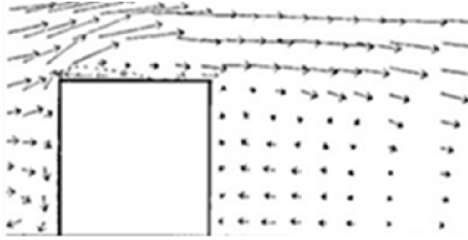
Os resultados experimentais mostram que os valores $\overline{u_1' u_1'}$ são maiores que $\overline{u_2' u_2'}$ e $\overline{u_3' u_3'}$ no teto do prédio. Na região de recirculação atrás do prédio, onde o vórtice de Von Kármán aparece, $\overline{u_2' u_2'}$ é dominante e assume valores maiores que $\overline{u_1' u_1'}$. Os resultados experimentais mostram também que os valores de $\overline{u_3' u_3'}$ são maiores próximo à face frontal do prédio.

A LES consegue reproduzir de maneira bastante acurada a distribuição das componentes normais do tensor das tensões no plano central do prédio nas direções $\overline{u_1' u_1'}$ e $\overline{u_2' u_2'}$. Entretanto,

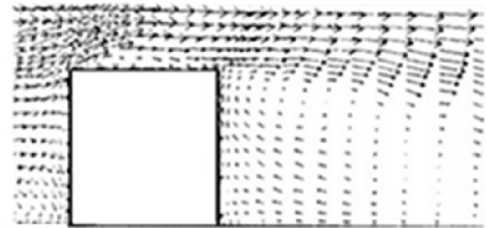
na face frontal não é observada dominância da tensão $\overline{u_3'u_3'}$ em relação às outras tensões normais.

Nos modelos k- ϵ Padrão, k- ϵ Modificado, k- ω SST (TS-4) e k- ω SST (TS-6) não é possível prever de forma correta a anisotropia da turbulência e predizem valores bastante similares para distribuição no plano central de $\overline{u_1'u_1'}$, $\overline{u_2'u_2'}$ e $\overline{u_3'u_3'}$. Esta deficiência pode ser fonte de erros para representação correta do escoamento e dispersão.

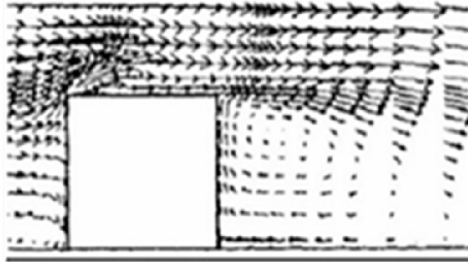
Figura 18 – Campo de Velocidade no plano central do prédio para os diferentes modelos de turbulência.



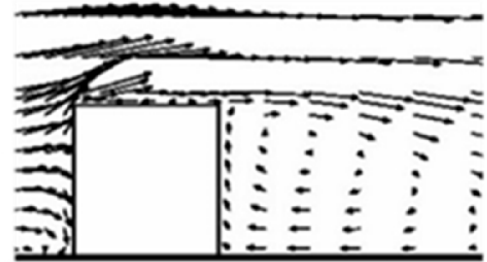
Túnel de vento (Murakami et al.,1990)



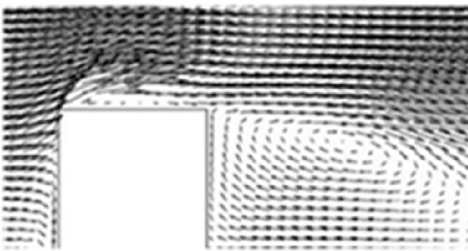
LES (Murakami et al.,1990)



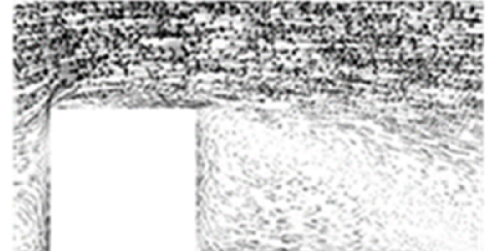
k-ε Padrão (Murakami et al.,1990)



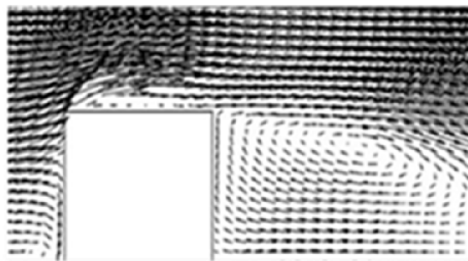
k-ε Modificado (Santos,2000)



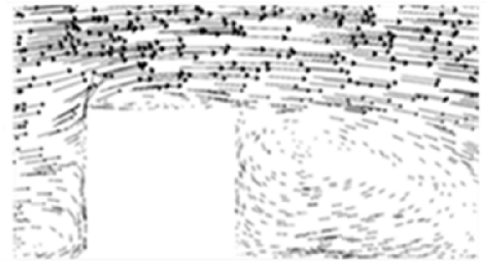
ω (Cezana, 2007)



k- ω SST (TS-4)

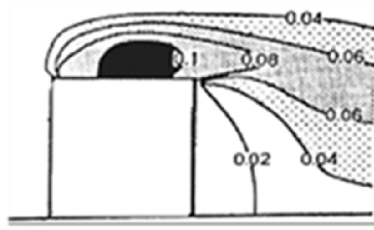


ω -BSL (Cezana, 2007)

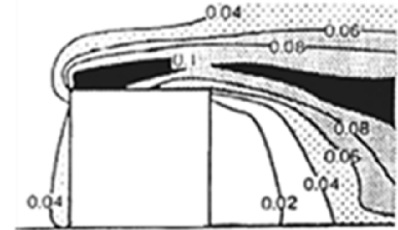


k- ω SST (TS-6)

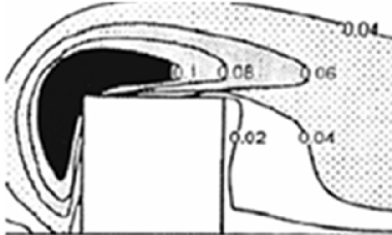
Figura 19 – Distribuição de Energia cinética turbulenta normalizado por U_H^2 .



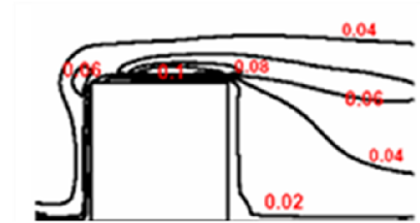
Túnel de vento (Murakami et al., 1990)



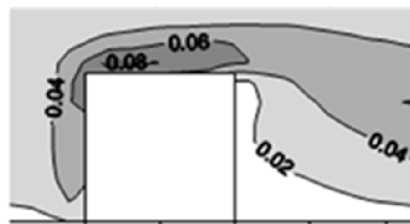
LES (Murakami et al., 1990)



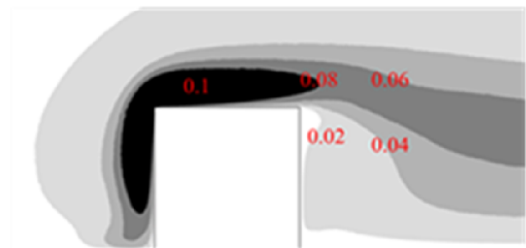
k-ε Padrão (Murakami et al., 1990)



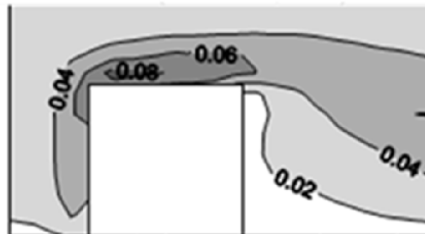
k-ε Modificado (Santos, 2000)



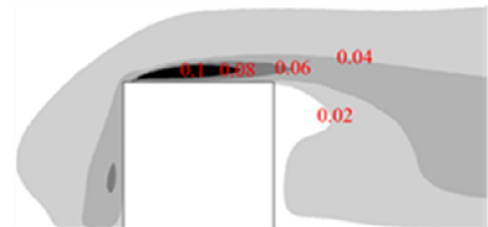
ω (Cezana, 2007)



k- ω SST (TS-4)

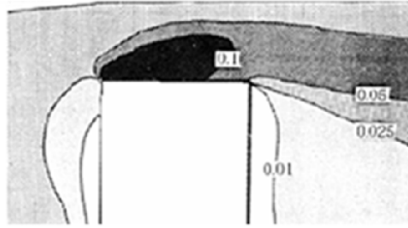


ω -BSL (Cezana, 2007)

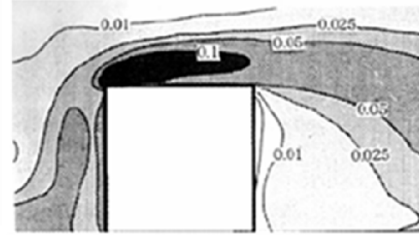


k- ω SST (TS-6)

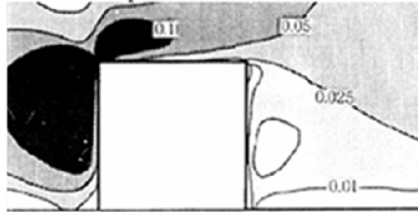
Figura 20 – Distribuição de $\overline{u_1' u_1'}$ normalizado por U_H^2 .



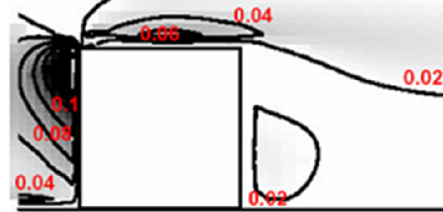
Túnel de vento (Murakami et al., 1990)



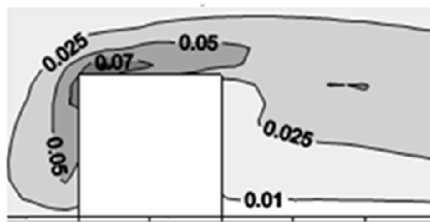
LES (Murakami et al., 1990)



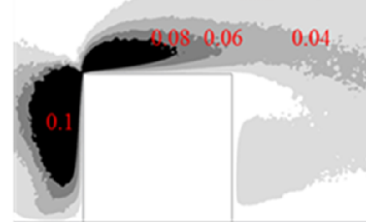
k- ϵ Padrão (Murakami et al., 1990)



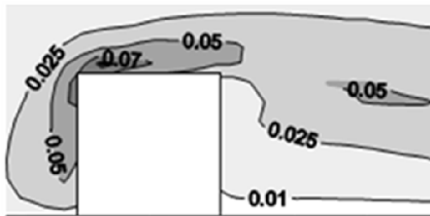
k- ϵ Modificado (Santos, 2000)



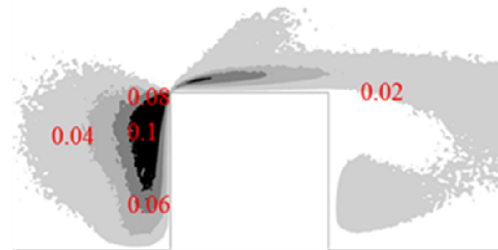
ω (Cezana, 2007)



k- ω SST (TS-4)

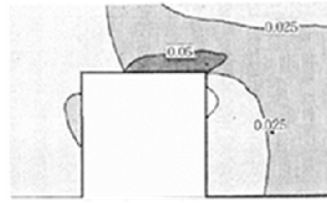


ω -BSL (Cezana, 2007)

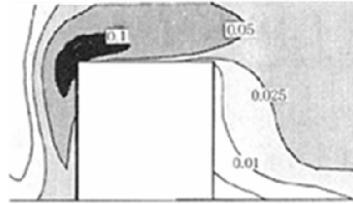


k- ω SST (TS-6)

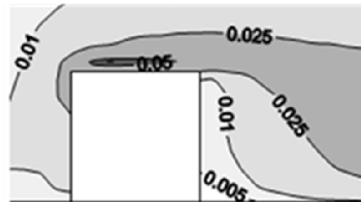
Figura 21 – Distribuição de $\overline{u_2' u_2'}$ normalizado por U_H^2 .



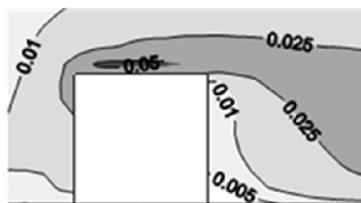
Túnel de vento (Murakami et al., 1990)



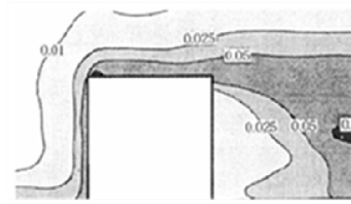
k-ε Padrão (Murakami et al., 1990)



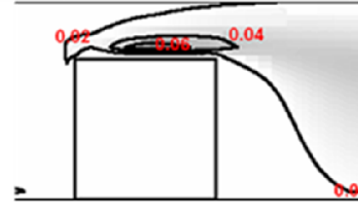
ω (Cezana, 2007)



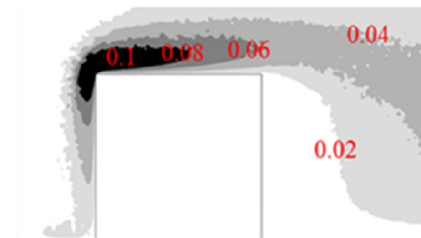
ω -BSL (Cezana, 2007)



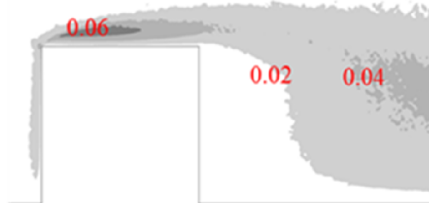
LES (Murakami et al., 1990)



k-ε Modificado (Santos, 2000)

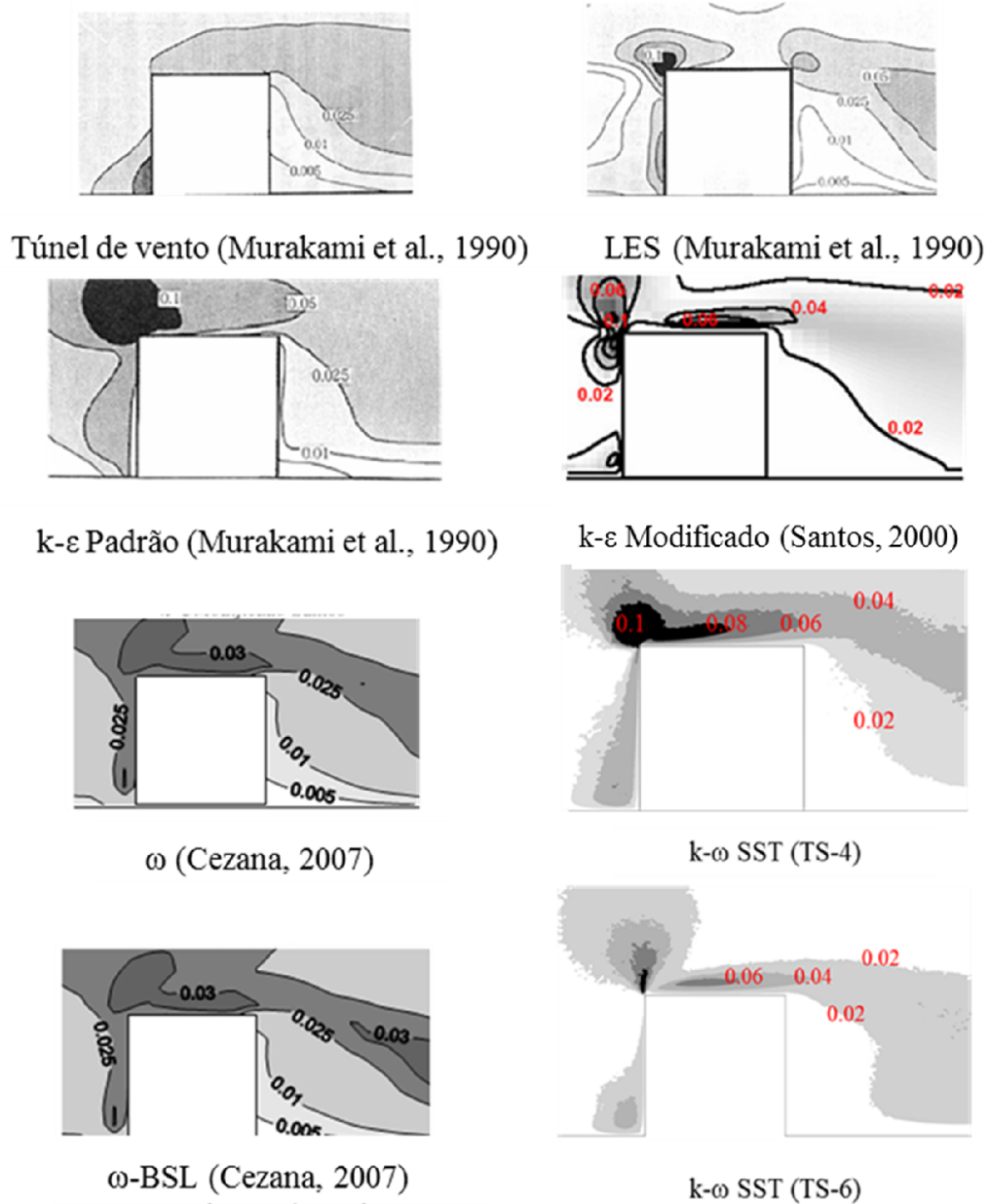


k- ω SST (TS-4)



k- ω SST (TS-6)

Figura 22 – Distribuição de $\overline{u_3'u_3'}$ normalizado por U_H^2 .



6.2 ANÁLISE NUMÉRICA DO ESCOAMENTO SEGUNDO AS CONDIÇÕES DO EXPERIMENTO EM TÚNEL DE VENTO DE MURAKAMI ET AL. (1990)

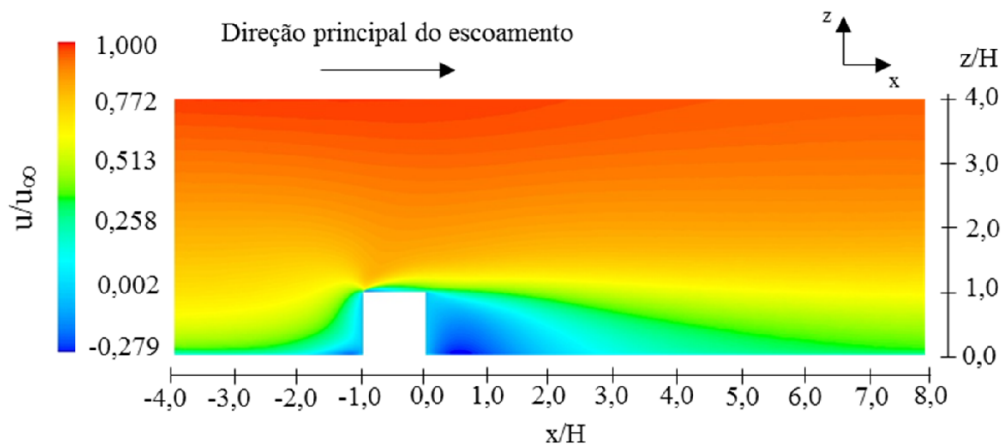
O escoamento de ar ao redor de um obstáculo cúbico isolado inserido em uma camada limite atmosférica é investigado nesta seção. A finalidade é apresentar resultados da solução das

equações governantes do modelo de turbulência $k-\omega$ SST, identificando detalhes que caracterizam o escoamento ao redor de um obstáculo cúbico isolado.

De maneira geral, o modelo $k-\omega$ SST (TS-4), aplicando $a_1=2$ e $C_{lim}=10$, apresentou boa concordância com as medições experimentais em túnel de vento. Os parágrafos seguintes apresentam resultados obtidos unicamente por meio de simulação numérica, com o objetivo de explicar com maior detalhamento algumas estruturas do escoamento complexo observado ao redor de obstáculos isolados.

A Figura 23 mostra a distribuição de velocidade longitudinal média representando o escoamento ao redor do obstáculo cúbico e atmosfera neutra obtida por meio de simulação numérica. A distribuição de velocidade longitudinal está localizada no plano vertical (xz) em $y/H=0,0$. A visualização não representa todo o domínio, mas uma parte, na vizinhança do obstáculo. O resultado apresentado está adimensionalizado pela velocidade do escoamento na corrente livre, $u_\infty=0,75$ m/s.

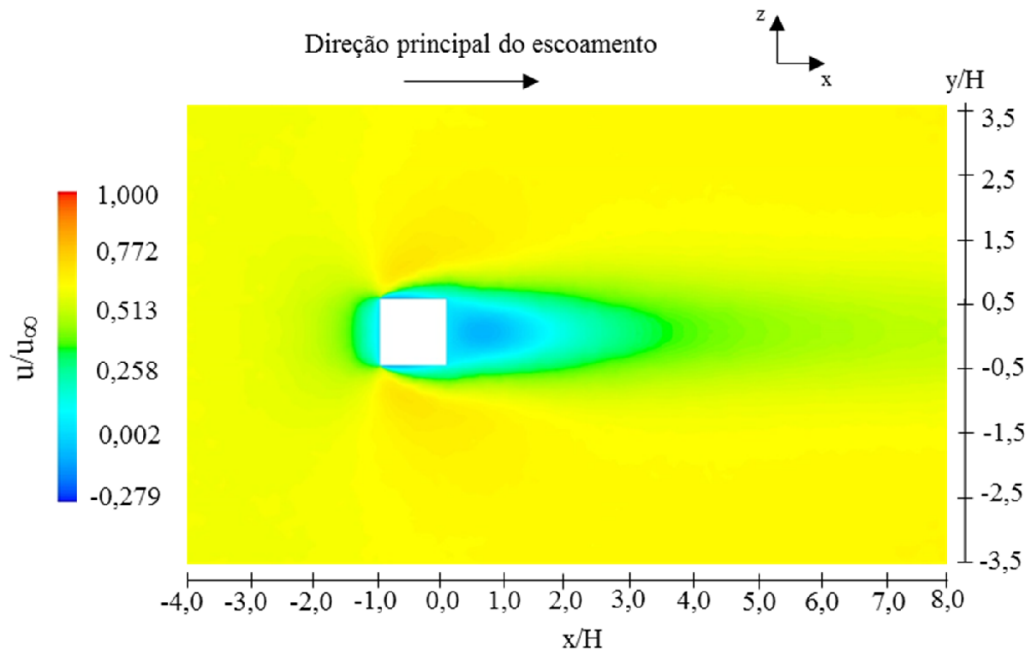
Figura 23 – Distribuição de velocidade longitudinal em plano vertical (xz) em $y/H=0,0$.



O escoamento ao redor do obstáculo cúbico mostrado na Figura 23 apresenta três zonas de recirculação mais observáveis: (i) na face de incidência do escoamento ($x/H = -1,0$), (ii) sobre o obstáculo ($x/H \approx -0,5$) e (iii) a jusante do obstáculo, de maior dimensão, cuja extensão será investigada mais precisamente nesta seção.

As zonas de recirculação são caracterizadas por velocidades longitudinais negativas agindo no sentido contrário da direção principal do escoamento. Notam-se ainda zonas de aceleração do escoamento, sendo a principal localizada na aresta de incidência do escoamento.

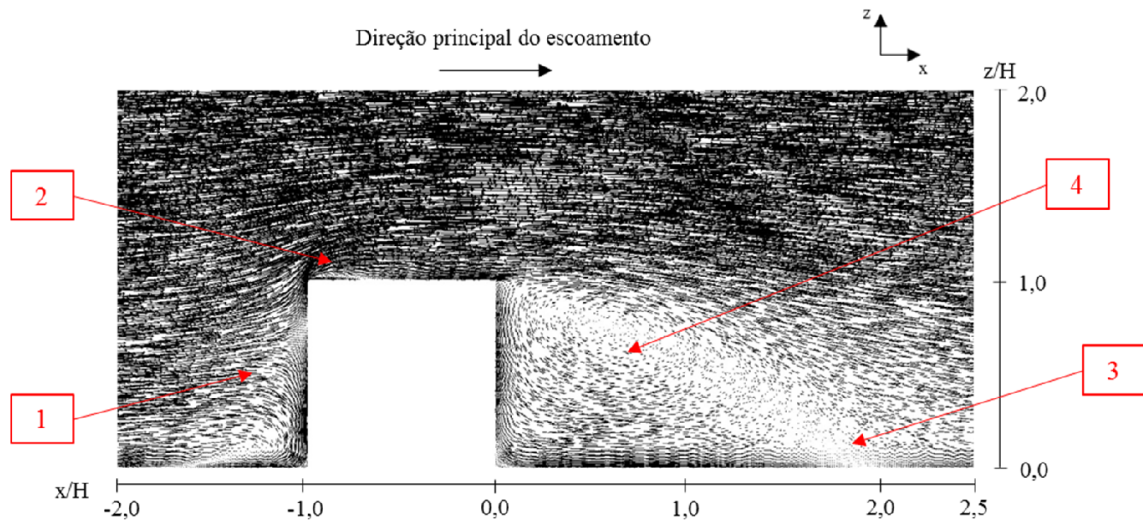
Figura 24 – Distribuição de velocidade longitudinal em vista superior no plano horizontal (xy) localizado em $z/H=0,5H$.



Analogamente à Figura 23, a Figura 24 mostra a distribuição de velocidade longitudinal em um plano horizontal e paralelo à parede inferior do domínio computacional. O plano (xy) está localizado em $z/H=0,5$. Na 23 podemos notar a recirculação lateral existente neste tipo de escoamento. Uma importante zona de descolamento é verificada na aresta de incidência do escoamento principal sobre o bloco, em suas laterais.

Na figura 25, observam-se no plano vertical longitudinal de simetria do domínio os vetores velocidade. O principal objetivo desta análise é apresentar outra forma usual de visualização da zona de recirculação existente à jusante do obstáculo. Especificamente nesta metodologia nota-se a presença de vetores com sentido contrário ao escoamento principal. A Figura mostra que o modelo $k-\omega$ SST é capaz de prever a zona de recirculação à jusante do prédio. O comprimento e o formato desta região são significativamente afetados pelo escoamento no teto e nas laterais do obstáculo.

Figura 25 – Campo de vetores de velocidade no plano central do prédio, modelo $k-\omega$ SST.



A Figura 25 detalha a influência da presença do obstáculo na formação de regiões específicas que ocorrem no escoamento ao redor do obstáculo, sob a visualização de vetores. O tamanho dos vetores reflete a magnitude da velocidade. No detalhe 1 o escoamento é separado pela presença do obstáculo. Esta região é conhecida como região de estagnação. Já no detalhe 2, pode-se verificar o recolamento no teto do prédio. O detalhe 3 mostra a formação de um grupo de vetores que tendem a direcionar o escoamento para o recolamento.

No detalhe 4 é evidenciada a cavidade de recirculação que é caracterizada por valores negativos de velocidade na direção principal do escoamento. O resultado obtido pelo modelo de turbulência é compatível com os resultados esperados, no que se refere à capacidade de prever as principais regiões que ocorrem no escoamento ao redor de um prédio.

O presente estudo permitiu encontrar, para as condições de escoamento realizadas em túnel de vento por Mavroidis et al. (1999), uma redução no comprimento da zona de recirculação com a inclusão da função “*Production Limiter*”, presente no pacote *Ansys Fluent* que utiliza a relação entre a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e a produção de energia cinética turbulenta por cisalhamento para as regiões de estagnação.

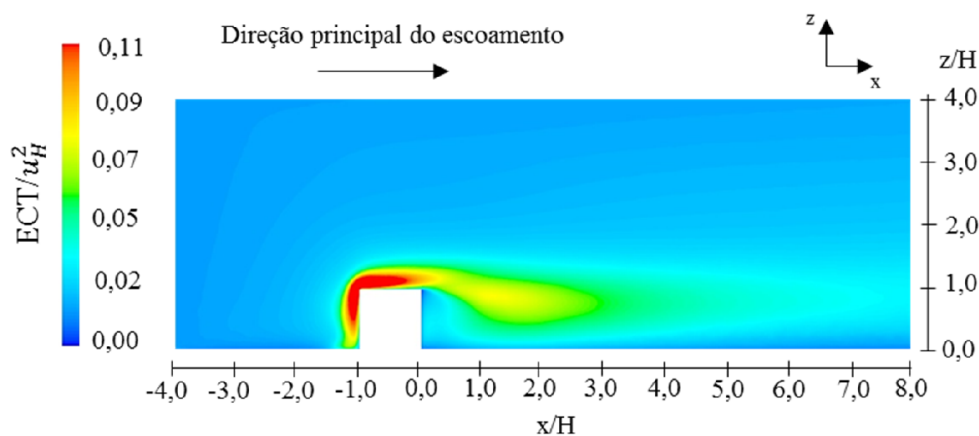
Em geral, na região próxima ao prédio onde as tensões cisalhantes passam a ser mais importantes, devido ao aumento do gradiente de velocidade no contato do fluido com as paredes do prédio, existe uma tendência a apresentar maior dificuldade em prever corretamente o campo de velocidade para o modelo utilizado no presente estudo. Isto se deve à elevada anisotropia do escoamento nesta região.

O modelo de turbulência utilizado não calcula diretamente os fluxos turbulentos que são expressos na matriz do tensor das tensões de Reynolds. Sendo assim, a metodologia aqui aplicada para solucionar o escoamento utiliza a abordagem proposta por Boussinesq, em 1877. Esta sugere que a tensão turbulenta está relacionada ao gradiente local de velocidades do escoamento médio, através da viscosidade turbulenta que é associada às características do fluido, do escoamento e da geometria envolvida no problema sob consideração. Esta importante consideração permite resolver o campo de escoamento. Entretanto, a forte anisotropia desta região, é, sem dúvidas, algo a ser considerado. Isto porque as componentes da matriz do tensor das tensões de Reynolds não são diretamente calculadas quando utilizamos os modelos com fechamento de primeira ordem.

Através da utilização da função *Production Limiters* é possível impor certa restrição ao termo de produção de energia cinética turbulenta nas zonas de estagnação e com isto reduzir o nível de viscosidade turbulenta e melhorar a capacidade de predição das zonas de separação. Testes realizados por Valger et al. (2015) concluíram que, para o modelo $k-\omega$ SST, nas regiões de estagnação, é utilizado fator igual a 10 vezes a dissipação específica de energia em relação à produção de energia cinética por cisalhamento, sendo utilizado no cálculo o menor valor entre eles.

A Figura 26 apresenta a energia cinética turbulenta (ECT) no plano de simetria em ($y/H=0,0$). Nela é possível perceber que ocorre um pico de produção de ECT na aresta superior na região de incidência do escoamento.

Figura 26 – Distribuição de ECT adimensionalizado por U_H^2



Pode-se afirmar que a produção de energia cinética turbulenta tem efeito significativo no aumento da anisotropia do escoamento e isto pode influenciar no comprimento da zona de

recirculação atrás do prédio, uma vez que a energia cinética turbulenta produzida devido ao cisalhamento é diretamente proporcional às flutuações de velocidade nas três direções.

Verificou-se, portanto, que o modelo de turbulência utilizado na condição $k-\omega$ SST (TS-4) é capaz de prever as principais estruturas que ocorrem no escoamento ao redor de um prédio.

6.3 DESEMPENHO DO MODELO DE TURBULÊNCIA $k-\omega$ SST PARA QUANTIFICAÇÃO DO DECAIMENTO TEMPORAL DE CONCENTRAÇÃO PARA ATMOSFERA ESTÁVEL E INSTÁVEL

A presente seção busca investigar a influência da estabilidade atmosférica (por meio da modificação do comprimento de Monin-Obukhov) na dispersão do composto gasoso propileno (C_3H_6), segundo as condições do experimento realizado por Mavroidis et al. (1999). Nesta seção, o principal objetivo é a discussão do tempo de residência do composto avaliado para condição de estabilidade atmosférica estável (ID 6-4 e ID 4-2) e instável (ID 5-5). A nomenclatura utilizada no artigo de Mavroidis et al. (1999) para diferenciar cada caso testado foi mantida, a fim de facilitar a leitura e possível comparação com o trabalho citado.

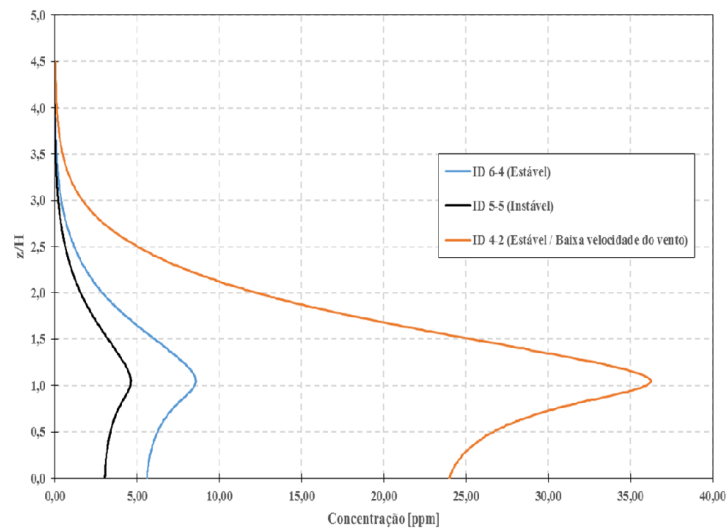
A utilização dos dados experimentais de Mavroidis et al. (1999) para avaliação da modelagem para a dispersão do composto gasoso se faz necessária para complementar os resultados apresentados nas seções precedentes com relação ao escoamento e dispersão em diferentes condições de estabilidade atmosférica. A seção 6.1 apresentou resultados comparativos para o escoamento, segundo as condições do experimento Murakami et al. (1990). Destacaram-se (apresentaram melhor resultado na comparação com os experimentos) dois testes de sensibilidade, TS-4 e TS-6, o primeiro com menor zona de recirculação e baixa resolução na predição de ECT e o segundo com maior zona de recirculação e alta resolução na predição de ECT.

O estudo apresentado na presente seção utilizou as constantes, segundo a condição TS-4. Vale ressaltar que as simulações de avaliação do decaimento temporal foram realizadas segundo as duas condições (TS-4 e TS-6), porém não foi observada diferença significativa para decaimento temporal entre TS-4 e TS-6.

A Figura 27 exhibe perfis verticais de concentração, localizados no plano de simetria em $0,75H$ à jusante do obstáculo próximo à esteira turbulenta. Nota-se que as concentrações máximas

ocorrem na altura do edifício em todos os casos. A partir do conhecimento dos comprimentos de Monin-Obukhov para os casos testados, era esperado que as condições muito estáveis (ID 6-4) e muito instável (ID 5-5) revelassem, respectivamente, menor diluição e maior diluição que a condição estável com baixa velocidade do vento (ID 4-2). Entretanto, a condição estável com baixa velocidade do vento (ID 4-2) apresentou menor diluição do composto indicando que o efeito da velocidade do vento foi mais importante na diluição que a estabilidade atmosférica.

Figura 27 – Comparação dos perfis verticais de concentração localizados à jusante do prédio em 0,75H: atmosfera instável e estável.



A concentração adimensional K é definida como:

$$K = \frac{C}{C_0} \quad (51)$$

onde:

C - Fração molar do composto gasoso;

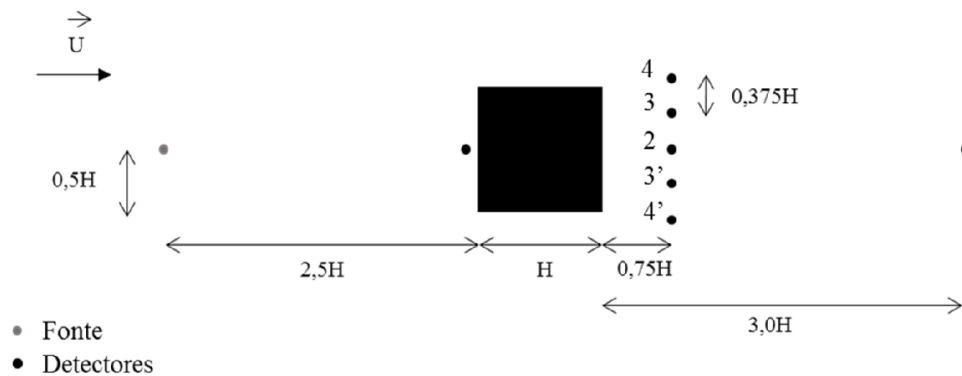
C_0 - Concentração de referência.

$$C_0 = \frac{Q}{U_H H^2} \quad (52)$$

Para este estudo foi calculada a concentração de referência C_0 .

Conforme descrito anteriormente o principal objetivo desta seção é investigar o tempo de residência do composto gasoso, conforme condições do experimento de campo realizado por Mavroidis et al (1999), em três condições: ID 5-5 (atmosfera instável), ID 6-4 (atmosfera estável), ID 4-2 (atmosfera estável e menor velocidade do vento). É importante informar que os tempos de decaimento não sofreram alterações quando utilizada a correção TS-4 ou TS-6.

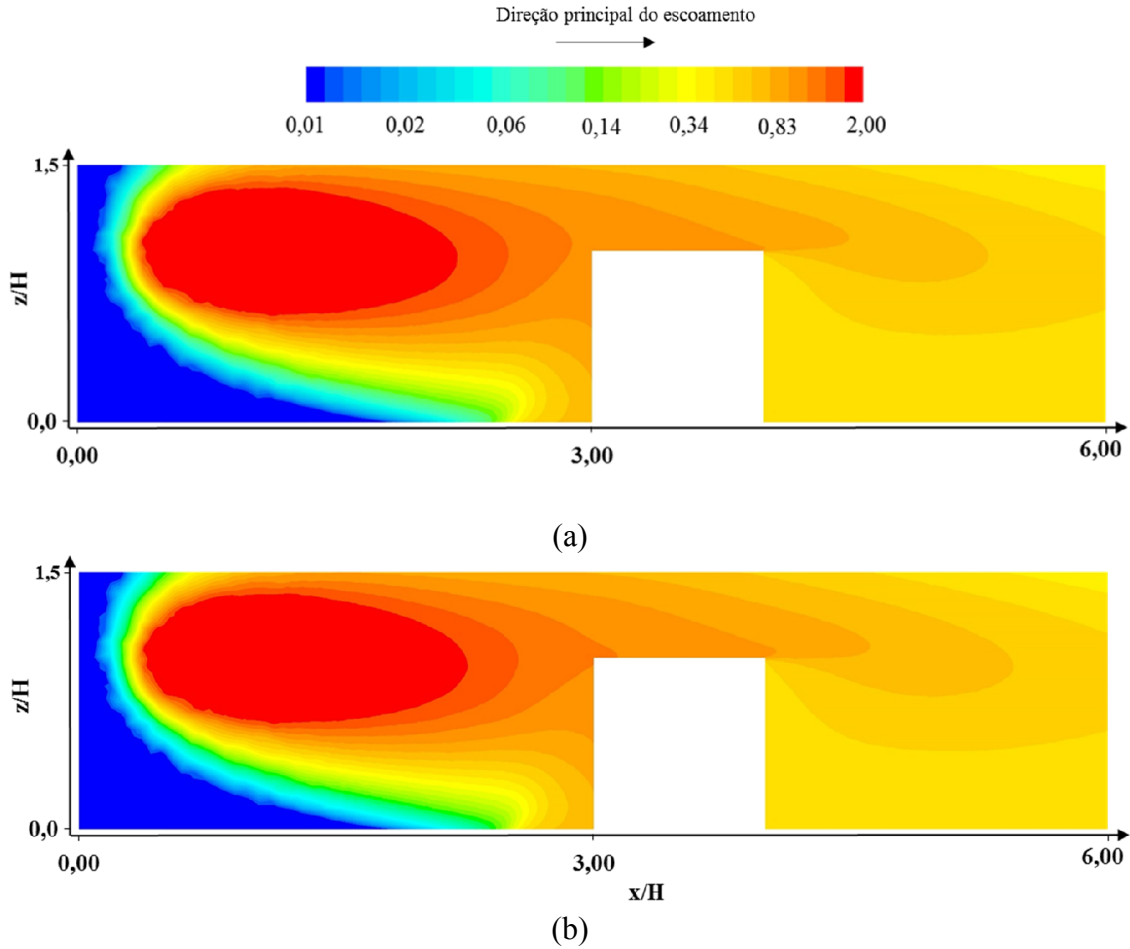
Figura 28 – Localização dos detectores, plano x-y em $z/H=0,5$.



A Figura 28 exibe a localização dos detectores, em relação à fonte e ao obstáculo, que serão utilizados na estimativa do tempo de residência.

A Figura 29 apresenta a distribuição de concentração adimensional, K , no plano xz em $y=0,0$, para dois casos testes (ID 4-2 e ID 5-5). A vista do plano central evidencia que não há diferença significativa na dispersão, para o campo de concentração adimensional K . A concentração adimensional exclui o efeito da velocidade na dispersão. As figuras ilustram que não há modificação na dispersão devido à estabilidade atmosférica para condição instável (ID 5-5) e estável com baixa velocidade do vento (ID 4-2).

Figura 29 – Contorno de concentração adimensional, K, vista do plano central do prédio (a) ID 4-2 (estável / baixa velocidade do vento); (b) ID 5-5 (instável).



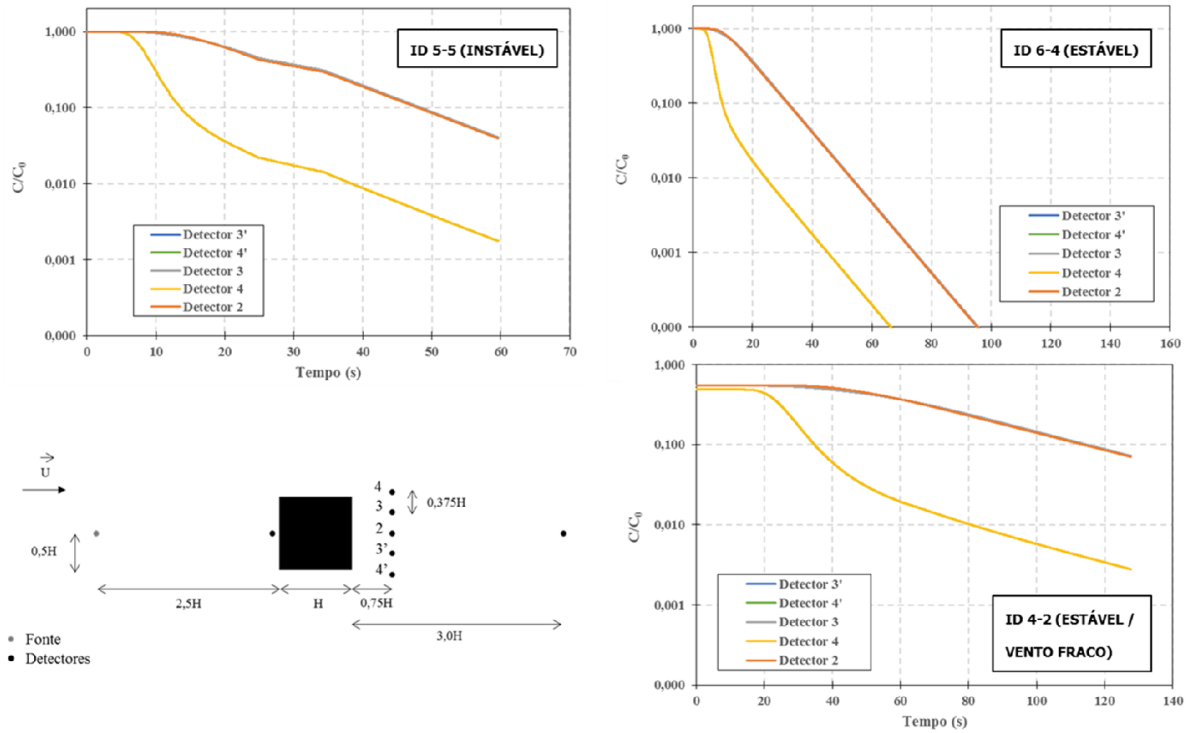
O tempo de residência (T_d) é definido como o tempo em que a concentração do composto gasoso decai a $1/e$ do seu valor inicial. Este valor é dependente da estabilidade atmosférica e fortemente influenciado pela velocidade do vento. O tempo de residência adimensional (τ) é independente da condição de estabilidade atmosférica e é calculado pela Equação 53.

$$\tau = \frac{U_H T_d}{H} \quad (53)$$

A Figura 30 apresenta o decaimento temporal nos detectores para cada caso em relação à disposição dos detectores. Nota-se que o decaimento da concentração de propileno tem taxa maior nos detectores posicionados mais próximos das bordas do prédio (4 e 4'). Isto acontece em razão do menor efeito da recirculação atrás do prédio nestes detectores. Os detectores 2 e 3 foram responsáveis por superestimar o tempo de residência. Os detectores 2, 3 e 3' apresentam

tempo de decaimento igual em todas as situações, isto se deve ao fato de os detectores estarem localizados dentro da zona de recirculação atrás do prédio.

Figura 30 – Comparação do decaimento temporal nos detectores para diferentes condições de estabilidade atmosférica: (a) ID 5-5, instável, (b) ID 6-4, estável e (c) ID 4-2, estável e ventos fracos.



A Tabela 8 mostra uma comparação entre os resultados de tempos de residência (T_d e τ) experimentais, das simulações numéricas do presente estudo, e do modelo k-l apresentado em Mavroidis et al. (2012). Vale ressaltar que os resultados de decaimento temporal são compatíveis com os experimentais e são da mesma ordem de grandeza. É possível perceber que o modelo k- ω SST (TS-4) apresentou menor taxa de diluição na esteira turbulenta em relação tanto aos dados experimentais quanto aos resultados do modelo k-l. Os resultados de tempo de residência adimensional também apresentaram menor diluição do poluente no presente estudo e consequentemente maior tempo de residência.

Tabela 8 – Comparação do tempo de residência (T_d) e tempo de residência adimensional (τ) do decaimento da concentração do composto gasoso

Caso	Experimental (Mavroidis et al., 1999)	k-ω SST (TS-4)	Modelo k-l (Mavroidis et al., 2012)	Experimental (Mavroidis et al., 1999)	k-ω SST (TS-4)	Modelo k-l (Mavroidis et al., 2012)
	T_d [s]			τ [-]		
ID 5-5 Instável	8,84	13,30	5,30	5,30	7,98	3,20
ID 6-4 Estável	7,64	9,43	5,20	6,30	7,83	4,30
ID 4-2 Estável	29,17	45,50	23,70	5,50	8,63	4,50

O decaimento da concentração na esteira turbulenta de obstáculos cúbicos isolados a partir do desligamento de uma fonte é aqui examinado com o modelo k- ω SST (TS-4) para diferentes condições de estabilidade atmosférica, porque foram observadas lacunas na revisão da literatura de estudos numéricos que investiguem o tempo de residência e o comportamento de gases na esteira turbulenta de um edifício cúbico isolado. Observou-se que T_d é significativamente maior para condição atmosférica estável e vento fraco. Por outro lado, o tempo de residência adimensional não exibe significativa dependência da estabilidade atmosférica, quando observados os resultados para ID 5-5, ID 6-4 e ID 4-2.

7 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Neste capítulo são apresentadas as principais conclusões sobre o estudo exposto nesta dissertação, bem como, recomendações para trabalhos futuros.

7.1 CONCLUSÕES

Nesta dissertação foram estudados, por meio de simulações numéricas, o escoamento e dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo cúbico isolado, sob diferentes condições de estabilidade atmosférica, tendo como objetivo avaliar o desempenho do modelo de turbulência $k-\omega$ SST. O modelo matemático utilizado é baseado nas equações de conservação da massa, quantidade de movimento, energia e espécie química, com a aplicação do método dos volumes finitos para a solução numérica do problema. A escolha do modelo de turbulência a ser investigado foi realizada após ampla revisão da literatura, onde se verificou: (i) a metodologia RANS apresenta menor custo computacional para resolução das equações de conservação e (ii) estudos revelaram razoável capacidade para resolução de escoamentos turbulentos em situações de gradientes adversos de pressão com o modelo $k-\omega$ SST.

Na primeira etapa de avaliação do desempenho do modelo, buscou-se representar o escoamento ao redor de um obstáculo como estudado em túnel de vento (MURAKAMI et al., 1990). Em geral, a constante a_1 e C_{lim} influenciaram a predição do escoamento para o modelo, sendo que TS-4 e TS-6 representaram, respectivamente, melhor concordância para o comprimento da zona de recirculação e da energia cinética turbulenta. Os resultados de oito testes de sensibilidade do modelo de turbulência à variação de constantes empíricas (a_1 e C_{lim}) mostraram menor comprimento da zona de recirculação atrás do prédio (TS-4) ou melhores resultados de ECT nas zonas de estagnação (TS-6), sendo que os resultados da predição do escoamento melhoraram quando comparados com resultados experimentais ou da LES (MURAKAMI et al., 1990). Em ambos foi possível predizer o descolamento do escoamento no canto frontal do prédio e posterior recolamento no teto do prédio.

Na segunda etapa de avaliação do desempenho do modelo, buscou-se utilizar o melhor ajuste para a menor zona de recirculação atrás do prédio $k-\omega$ SST (TS-4), para representar o experimento realizado em campo por Mavroidis et al. (1999). Observou-se uma menor diluição

da pluma para a condição estável e com baixa velocidade do vento. Os resultados revelaram também, para as condições atmosféricas testadas, que o tempo de decaimento da concentração do composto gasoso na zona de recirculação tem menor erro percentual (em relação aos dados experimentais) que o modelo k-l previamente simulado por Mavroidis et al. (2012). Vale ressaltar que a imposição de perfil uniforme de temperatura na entrada do domínio computacional pode ter influenciado o resultado da simulação numérica.

Conforme relatado nas discussões do presente estudo, os modelos de turbulência baseados na viscosidade turbulenta estão sujeitos a constantes empíricas e inúmeros parâmetros que podem interferir na solução do escoamento e dispersão. As condições de contorno aqui utilizadas seguiram os dados experimentais que foram fornecidos. O tamanho do domínio computacional foi definido de acordo com estudo realizado por Gousseau et al. (2011), que verificou o tamanho do domínio, bem como as distâncias mínimas em relação ao tamanho do prédio, de modo a não haver interferências nos resultados da simulação.

O modelo de turbulência k- ω SST foi então avaliado quanto a seu desempenho para representar situações distintas. Uma análise global dos resultados apresentados nos fornece indicações das limitações do uso deste modelo para a predição do escoamento e dispersão de compostos gasosos ao redor de obstáculos isolados: (i) dificuldade em obter simultaneamente bom comportamento do comprimento da zona de recirculação e da energia cinética turbulenta para as constantes testadas; (ii) superestimação do tempo de decaimento da concentração do composto gasoso, medidos em detectores na esteira turbulenta do obstáculo; (iii) para os casos testados, pode-se afirmar que, sob o ponto de vista do campo de concentração adimensional, o cisalhamento no prédio observado é mais importante na dispersão que o efeito da estabilidade atmosférica na dispersão do composto gasoso.

Vale ressaltar que devido ao baixo custo computacional observado durante as simulações e à predição razoável para as variáveis investigadas, este modelo de turbulência tem capacidade de ser empregado em uma série de aplicações práticas, buscando-se o conhecimento dos fenômenos físicos envolvidos na modificação do escoamento, devido ao obstáculo e na dispersão de poluentes.

7.2 RECOMENDAÇÕES

Conforme descrito na seção 7.1, os resultados obtidos neste estudo necessitam de um melhor aperfeiçoamento para melhor representar os fenômenos de transporte de compostos gasosos na atmosfera. Alguns fatores importantes acerca da modelagem realizada neste estudo, que necessitam de investigação mais aprofundada, são apresentados a seguir:

- Investigar o escoamento e dispersão atmosférica na região de esteira quando mais de um obstáculo é incluído;
- Investigar o escoamento e dispersão atmosférica em diferentes condições de estabilidade atmosférica para geometrias não cúbicas;
- Investigar o escoamento e dispersão de poluentes com densidades diferentes da densidade do ar, para verificar o efeito na pluma de poluentes;
- Analisar a influência de diferentes valores das constantes empíricas investigadas nos testes de sensibilidade ($a_1 > 2,0$ e $C_{lim} = 10$ ou $a_1 = 2,0$ e $C_{lim} < 3,0$) com o objetivo de verificar qual combinação possui maior efeito na predição do comprimento da ZR e na ECT nas zonas de estagnação.

REFERÊNCIAS

AI, Z.T.; MAK, C.M. Large-eddy Simulation of flow and dispersion around an isolated building: Analysis of influencing factors. **Computers & Fluids**, n.118, p. 89-100. 2015.

ARAÚJO, F. N. **Modelagem da turbulência aplicada ao escoamento sobre uma placa plana inclinada**. Dissertação de Mestrado. Curso de Mestrado em Engenharia Mecânica. Instituto Militar de Engenharia. Rio de Janeiro-RJ. Brasil. 2012.

ARGYROPOULOS, C.D.; MARKATOS, N.C. Recent advances on the numerical modelling of turbulent flows. **Applied mathematical modelling**, n.39, p. 693-732. 2015.

ARYA, S. P. **Air Pollution, Meteorology and Dispersion**. Oxford University Press. New York. EUA. 1999.

BJORKEGREN, A.B.; GRIMMOND, C.S.B.; KOTTHAUS, S.; MALAMUD, B.D. CO₂ emission estimation in the urban environment: Measurement of the CO₂ storage term. **Atmospheric environment**, n. 122, p. 775-790. 2015.

BLOCKEN, B. 50 years of Computational Wind Engineering: Past, present and future. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 129, p. 69-102. 2014.

BRUSCA, S.; FAMOSO, F.; LANZAFAMEB, R.; GARRANO, A.M.C.; MONFORTE, P. Experimental analysis of a plume dispersion around obstacles. **ATI 2015 – 70th Conference of Engineering Association**, n. 82, p. 695-701. 2015.

BALOGH, M.; PARENTE, A. Realistic boundary conditions for the simulation of atmospheric boundary layer flows using an improved k- ϵ model. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 144, p. 183-190. 2015.

CEZANA, F. C. **Simulação numérica da dispersão de poluentes ao redor de um obstáculo isolado sob diferentes condições de estabilidade**. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental. Universidade Federal do Espírito Santo. Vitória-ES. Brasil. 2007.

COCEAL, O.; GOULART, E.V.; BRANFORD, S.; THOMAS, T.G.; BELCHER, S.E. Flow structure and near-field dispersion in arrays of building-like obstacles. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 125, p. 52-68. 2014.

CHAMBERS, S.D.; GALERIU, D.; ALASTAIR, W.; MELINTESCU, A. ; GRIFFITHS, A.D.; CRAWFORD, J; DYER, L; DUMA, M; ZORILA, B. Atmospheric stability effects on potential

radiological releases at a nuclear research facility in Romania: Characterising the atmospheric mixing state. **Journal of Environmental Radioactivity**, v. 154, p. 68-82. 2016.

CRAWFORD, J.; CHAMBERS, S.; COHEN, D.; ALASTAIR, W.; GRIFFITHS, A. Assessing the impact of atmospheric stability on locally and remotely sourced aerosols at Richmond, Australia, using Radon-222. **Atmospheric Environment**, v. 127, p. 107-117. 2016.

CHAMUFFO, D. **Microclimate for cultural heritage**. 2nd ed. Elsevier science B.V. 2014.

DOURADO, H. O. **Estudo da dispersão de gases odorantes ao redor de obstáculos através do modelo de pluma flutuante**. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental. Universidade Federal do Espírito Santo. Vitória-ES. Brasil. 2007.

GARCÍA, M.A.; SÁNCHEZ, M.L.; PÉREZ, I.A.; OZORES, M.I.; PARDO, N. Influence of atmospheric stability and transport on CH₄ concentrations in northern Spain. **Science of the Total Environment**, v. 550, p. 157-166. 2016.

GEORGE, W. K. **Lectures in Turbulence for the 21st Century**. Department of Aeronautics, Imperial College of London, London, UK e Department of Applied Mechanics, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden. 2013.

GOUSSEAU, P.; BLOCKEN, B.; VAN HEIJST, G.J.F. CFD simulation of pollutant dispersion around isolated buildings: On the role of convective and turbulent mass fluxes in the prediction accuracy. **Journal of Hazardous Materials**, v. 194, p. 422-434. 2011.

GOUSSEAU, P.; BLOCKEN, B.; VAN HEIJST, G.J.F. Large-Eddy Simulation of pollutant dispersion around a cubical building: Analysis of the turbulent mass transport mechanism by unsteady concentration and velocity statistics. **Environmental Pollution**, v. 167, p. 47-57. 2012.

HARMAN, I. N. **The energy balance of urban areas**. Ph. D. thesis. Department of Meteorology. University of Reading. 2003.

HENDERSON, S. B. Differences in heat-related mortality across four ecological regions with diverse urban, rural, and remote populations in British Columbia, Canada. **Health & Place**, v.23, p. 48-53. 2013.

HIGSON, H. Atmospheric Dispersion in the Vicinity of Isolated Cuboid Building. **2044-004-CBDE-Final Report**. 1995.

HOSKER, R. P. Jr. **Dispersion in the vicinity of buildings**. Second Conference on Applications of Air Pollution and Second Conference of Industrial Meteorology. American Meteorology Society. 24-28 mar. New Orleans, USA. p. 92- 107, 1980.

JADIDI, M.; BAZDIDI-TEHRANI, F.; KIAMANSOURI, M. Dynamic sub-grid scale turbulent Schmidt number approach in large eddy simulation of dispersion around an isolated cubical building. **Building Simulation**, v. 9, p. 183-200. 2016.

KOLMOGOROV, A. **The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers**. v. 30, p. 301-305, 1941.

LATEB, M.; MERONEY, R.N.; YATAGHENE M.; FELLOUAH, H.; SALEH, F.; BOUFADEL, M.C. On the use of numerical modelling for near-field pollutant dispersion in urban environments – A review. **Environmental Pollution**, v. 208, p. 271-283. 2016.

LIM, H.C; CASTRO, I.P.; HOXEY, R.P. Bluff bodies in deep turbulent boundary layers: Reynolds-number issues. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 571, p. 97-118. 2007.

LIU, J.; JIANLEI, N. CFD simulation of the wind environment around an isolated high-rise building: An evaluation of SRANS, LES and DES models. **Building and Environment**, v. 96, p. 91-106. 2016.

MANDEL, A.; STERN, E.; ULLMANN, A.; BRAUNER, N. Setting threshold values of particle sizes for determination of the appropriate dispersion/deposition model during various atmospheric stability conditions. **Atmospheric Environment**, v. 105, p. 181-190. 2015.

MATTUELLA, J. **Avaliação em túnel de vento do comportamento da camada limite atmosférica em terrenos complexos**. Tese de doutorado. Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil. Universidade Federal do Rio Grande do Sul. 286 f. 2012.

MAVROIDIS, I.; ANDRONOPOULOS, S.; BARTZIS, J.; GRIFFITHS, R. Atmospheric dispersion in the presence of a three-dimensional cubical obstacle: Modelling of mean concentration and concentration fluctuations. **Atmospheric Environment**, v. 41, p. 2740-2756. 2007.

MAK, C.M., AI, Z.T. CFD Simulation of flow and dispersion around an isolated building: Effect of inhomogeneous ABL and near-wall treatment. **Atmospheric Environment**, v. 77, p. 568-578. 2013.

MAVROIDIS, I., GRIFFITHS, R., JONES, C.; BILTOFT, C. Experimental investigation of the residence of contaminants in the wake of an obstacle under different stability conditions. **Atmospheric Environment**, v. 33, p. 939-949. 1999.

MENTER, F. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering. **AIAA-Journal**, v. 32. 1994.

MOHAN, M.; SIDDIQUI, T. Applied Modeling of Surface Fluxes under Different Stability Regimes. **American Meteorological Society**, p. 1055-1067. 1998.

MURAKAMI, S.; MURAKAMI, S. Comparison of various turbulence models applied to a bluff body. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 46-47, p. 21-36. 1993.

PETERKA, J.; MERONEY, R.; KOTHARI, K. Wind flow patterns about buildings. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, v. 21, p. 21-38. 1985.

PONTIGGIA, M.; DERUDI, M.; BUSINI, V.; ROTA, R. Hazardous gas dispersion: A CFD model accounting for atmospheric stability classes. **Journal of Hazardous Materials**, v. 171, p. 739-747. 2009.

POPE, S. **Turbulent flows**. New York: Press Syndicate of the University of Cambridge. 2000.

REZENDE, A.L.T. **Análise Numérica da Bolha de Separação do Escoamento Turbulento sobre Placa Plana Fina Inclinada**. Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica. Rio de Janeiro-RJ. 2009.

ROCHA, P.; ROCHA, H.; CARNEIRO, F.; SILVA, M. **k- ω SST (Shear Stress Transport) turbulence model calibration: A case study on small scale horizontal axis wind turbine**. v. 65, p. 412-418. 2014.

RONG, L.; NIELSEN, P. V.; ZHANG, G. Experimental and numerical study on effects of airflow and aqueous ammonium solution temperature on ammonia mass transfer coefficient. **Journal of the Air & Waste Management Association**, v. 60, p. 419-428, 2010.

SANTOS, J. **Flow and Dispersion Around Isolated Buildings**. Ph. D. Thesis. Department of Chemical Engineering. University of Manchester. England. 2000.

SANTOS, J.; REIS, N.; GRIFFITHS, R.; MAVROIDIS, I. Numerical simulation of flow and dispersion around an isolated cubical building: The effect of the atmospheric stratification. **Atmospheric Environment**, n. 43, p. 5484-5492. 2009.

SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. **Atmospheric chemistry and physics – from air pollution to climate change**. John Wiley & Sons, Inc. 2a Ed. Hoboken. New Jersey. 2006.

SNYDER, W. H. **Some observations of the influence of stratification on diffusion in building wakes, in stably stratified flows.** 1994.

STERN, A.; BOUBEL, R.; TURNER, D.; FOX, D. **Fundamentals of Air Pollution.** Ed. London: Academic Press. 2nd. Ed. 1984.

STULL, R. **An Introduction to Boundary layer Meteorology.** Ed. Kluwer Academic Publishers. 2001.

TOMINAGA, Y.; AKABAYASHI, S.; KITAHARA, T.; ARINAMI, Y. Air flow around isolated gable-roof pitches: Wind tunnel experiments and CFD simulations. **Atmospheric Environment**, n. 84, p. 204-213. 2015.

TOMINAGA, Y.; BLOCKEN, B. Wind tunnel analysis of flow and dispersion in cross-ventilated isolated buildings: Impact of opening positions. **Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics**, n. 155, p. 74-88. 2016.

VALGER, S.A.; FEDOROVA, N.N.; FEDOROV, A.V. Structure of turbulent separated flow in the neighborhood of a plate-mounted prism of square section. **Thermophysics and Aeromechanics**, n.1, vol. 22. 2015.

XING, J.; ZHENYI, L.; HUANG, P. Experimental and numerical study of the dispersion of carbon dioxide plume. **Journal of Hazardous Materials**. p. 256-257. 2013.

YAN, B.W.; LI, Q.S.; HE, Y.C.; CHAN, P.W. RANS simulation of neutral atmospheric boundary layer flows over complex terrain by proper imposition of boundary conditions and modification on the k- ϵ model. **Environmental Fluid Mechanics**. v. 16, p. 1-23. 2016.

YASSIN, M. Wind tunnel study on the effect of thermal stability on flow and dispersion of roof top stack emissions in the near wake of a building. **Atmospheric Environment**. v. 65, p. 89-100. 2013.

ZHANG, Y. Q.; ARYA, S. P.; SNYDER, W. H. A comparison of numerical and physical modeling of stable atmospheric flow and dispersion around a cubical building. **Atmospheric Environment**. v. 30, p. 1327-1345. 1996.